

Universität Leipzig
Fakultät für Mathematik und Informatik
Mathematisches Institut

„Effiziente Simulation von stationären mikromagnetischen Phänomenen“

Diplomarbeit

Leipzig, 26. Oktober 2009

vorgelegt von
Michael Bratsch, 9360275
Diplomstudiengang Mathematik

Betreuender Hochschullehrer: Prof. Dr. Mario Bebendorf
(Universität Bonn, Institut für Numerische Simulation)

Einleitung

Motivation und Zielstellung

Eine zentrale Bedeutung bei der Simulation von stationären mikromagnetischen Phänomenen hat die Landau-Lifshitz-Energie [1], im Folgenden meist als mikromagnetische Energie bezeichnet. Es hat sich gezeigt, dass Zustände in ferromagnetischen Materialien durch lokale und globale Minimierer dieser Energie gegeben sind [2]. Somit ist es das Ziel der aktuellen Forschung, ein Magnetisierungsvektorfeld in einem Gebiet $\Omega \in \mathbb{R}^d$, $d = 2, 3$, zu finden, so dass die mikromagnetische Energie für bestimmte Parameter minimal wird. Eine Besonderheit hierbei ist die punktweise Einschränkung der Magnetisierung innerhalb des Gebietes Ω auf die Länge 1.

Im Rahmen dieser Diplomarbeit beschränken wir uns auf den dreidimensionalen Fall. Dieser ist für die Anwendung, zum Beispiel bei magnetischen Datenträgern [3], von großer Bedeutung. Es besteht die Möglichkeit, den Übergang zum zweidimensionalen Raum durch extrem dünne Schichten zu simulieren.

Die mikromagnetische Energie besteht aus verschiedenen Teilenergien, die sich mit unterschiedlichem Aufwand berechnen lassen. Es treten dabei lokale und nichtlokale Operatoren auf. Weiterhin müssen wir die Laplace-Gleichung mit Sprungbedingungen lösen. Es folgt die Berechnung singulärer Integrale und vollbesetzter Matrizen. Im Anschluss wird die gesamte mikromagnetische Energie minimiert.

Die Berechnung der mikromagnetischen Energie und deren Minimierung kann auf verschiedene Weise erfolgen. Ziel dieser Arbeit ist es, moderne und effiziente Methoden vorzustellen, um eine Lösung des Problems bei möglichst geringer Laufzeit und niedrigem Speicherbedarf zu garantieren. Dies bedeutet in unserem Fall, eine lineare oder quasi-lineare Gesamtkomplexität zu erreichen.

Numerische Simulationen sollen im Anschluss zeigen, wie gut die Vorgaben umgesetzt werden konnten. Weiterhin wird die Richtigkeit der Implementierung anhand von Standardbeispielen getestet [4].

Aufbau

Im ersten Kapitel dieser Arbeit werden die für unsere Betrachtungen wichtigen Grundlagen der Finite-Elemente-Methode und Randelemente-Methode behandelt. Es werden bestimmte partielle Differentialgleichungen und deren Variationsformulierung beschrieben. Berechnungen und ausgewählte Matrizen werden vorgestellt, so dass später auf diese verwiesen werden kann.

Im zweiten Kapitel stellen wir die einzelnen Summanden der Landau-Lifshitz-Energie vor. Wir beschäftigen uns mit deren Berechnung und den Richtungsableitungen der Teilenergien. Die Streufeldenergie wird in diesem Kapitel nur angeschnitten.

Aufgrund der Schwierigkeiten bei der Berechnung der Streufeldenergie beschäftigt sich das dritte Kapitel damit, diese zu beheben. So befassen wir uns zum Beispiel mit der Duffy-Transformation, um die Berechnung bestimmter schwach singulärer Integrale zu vereinfachen.

Das vierte Kapitel beschreibt den Aufbau der \mathcal{H} -Matrizen, die wir für die Abspeicherung vollbesetzter Matrizen benötigen. Wir beschäftigen uns mit der hierarchischen LU -Zerlegung zur Lösung linearer Gleichungssysteme. Weiterhin präsentieren wir das ACA-Verfahren und erhalten eine effiziente Methode zur Erzeugung der \mathcal{H} -Matrizen, um so später die Streufeldenergie zu berechnen.

Im fünften Kapitel werden zwei Verfahren zur Energieminimierung beschrieben. Zum einen handelt es sich um das Verfahren von Alouges, zum anderen um ein nichtlineares Verfahren der konjugierten Gradienten.

Im sechsten Kapitel werden die durchgeführten Tests der Implementierung beschrieben. Wir wählen Testsettings, bei denen die Lösungen bekannt sind und vergleichen sie mit unseren Resultaten.

Das siebente Kapitel bietet eine Zusammenfassung der gesamten Arbeit und schildert die erreichten Ziele. Im achten und letzten Kapitel befindet sich ein kleiner Ausblick, wie man in diesem Gebiet weiterarbeiten könnte und Verbesserungsmöglichkeiten werden aufgezeigt.

Danksagung

Zu allererst danke ich meinem Betreuer, Prof. Dr. Mario Bebendorf, der durch seine zahlreichen Bemühungen und Anregungen diese Diplomarbeit vorangetrieben hat. Weiterhin gilt mein Dank Thomas Fischer und allen anderen Mitarbeitern des Instituts für Numerik für ihre Ratschläge bei Problemen in verschiedensten Gebieten rund um diese Arbeit.

Entscheidend beim Gelingen dieser Arbeit war jedoch auch die Betreuung abseits der Universität. So gilt mein Dank meinen Eltern, die mich all die Jahre unterstützt und mir dieses Studium erst ermöglicht haben. Weiterhin danke ich meiner Freundin und meinen Freunden, die mir Ablenkungen in den unterschiedlichsten Weisen beschert haben.

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	i
Danksagung	iii
1 Numerische Lösung ausgewählter elliptischer Differentialgleichungen zweiter Ordnung	1
1.1 Elliptische Differentialgleichungen zweiter Ordnung	1
1.2 Variationsformulierung	2
1.3 Finite-Elemente-Methode	4
1.4 Randelemente-Methode	10
2 Das Landau-Lifschitz-Modell	13
2.1 Zeeman-Energie	13
2.2 Anisotrope Energie	14
2.3 Austauschenergie	15
2.4 Streufeldenergie	16
3 Die Berechnung der Streufeldenergie	18
3.1 Verschiedene Ansätze	18
3.2 Berechnung von u_1	23
3.3 Berechnung von u_2	23
3.4 Duffy-Transformation	28
4 Hierarchische Matrizen	33
4.1 Aufbau	33
4.2 Hierarchische LU -Zerlegung	35
4.3 ACA-Verfahren	36
5 Energieminimierung	38
5.1 Verfahren von Alouges	38
5.2 Nichtlineares Verfahren der konjugierten Gradienten	41
6 Das Testen der Algorithmen	43
6.1 Austauschenergie	44
6.2 Streufeldenergie	45
6.3 μ MAG Standardproblem Nr. 3	46

6.4	Zeitmessungen	49
6.5	Speicherbedarf	50
7	Zusammenfassung	53
8	Ausblick	54
	Eidesstattliche Erklärung	vi
	Anhang	vii
	Literaturverzeichnis	xiii

Kapitel 1

Numerische Lösung ausgewählter elliptischer Differentialgleichungen zweiter Ordnung

1.1 Elliptische Differentialgleichungen zweiter Ordnung

Es sei L ein Differentialoperator zweiter Ordnung mit

$$Lu := - \sum_{i,k=1}^d a_{ik}(\mathbf{x}) \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_k} + \sum_{i=1}^d b_i(\mathbf{x}) \frac{\partial u}{\partial x_i} + c(\mathbf{x})u. \quad (1.1)$$

Dabei ist $A(\mathbf{x}) := (a_{ik}(\mathbf{x}))$ eine symmetrische $d \times d$ Matrix und u eine skalare reelle Funktion auf einem beschränkten, einfach zusammenhängenden Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ mit hinreichend glattem Rand $\partial\Omega$. Ist die Matrix $A(\mathbf{x})$ positiv definit und eine Funktion f gegeben, so bezeichnet

$$Lu = f \quad (1.2)$$

eine elliptische Differentialgleichung zweiter Ordnung. Vorerst sei $u \in C^2(\Omega) \cap C^0(\overline{\Omega})$ eine so genannte klassische Lösung. Es bezeichnet $\overline{\Omega}$ den Abschluss der Menge Ω . Für weitere Betrachtungen wird oftmals vorausgesetzt, dass die Koeffizientenfunktionen aus (1.1) genügend glatt sind.

Beispiel 1.1.1. Eine der bekanntesten elliptischen Differentialgleichungen zweiter Ordnung ist die Poisson-Gleichung

$$-\Delta u = f(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega,$$

mit $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$.

Im Allgemeinen ist (1.2) nur als Randwertproblem sachgemäß gestellt [5]. Dies bedeutet, dass die Lösung eindeutig ist und von den vorgegebenen Daten stetig abhängt. Für unsere folgenden Betrachtungen ist die Kategorie der wesentlichen oder Dirichlet-Randbedingungen wichtig

$$u = g \quad \text{auf } \partial\Omega.$$

1.2 Variationsformulierung

Zuerst betrachten wir einen abstrakten Charakterisierungssatz über Variationsaufgaben. Eine ausführlichere Beschreibung und Beweise zu diesem und zu den folgenden Sätzen aus diesem Kapitel befinden sich in [5].

Satz 1.2.1 (Charakterisierungssatz). *Es sei ein linearer Raum V mit einer symmetrischen, positiven Bilinearform*

$$a : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$$

gegeben. Weiterhin ist

$$l : V \rightarrow \mathbb{R}$$

ein lineares Funktional. Es nimmt

$$J(v) := \frac{1}{2}a(v, v) - \langle l, v \rangle \quad \text{in } V$$

sein Minimum genau dann bei u an, wenn

$$a(u, v) = \langle l, v \rangle, \quad \forall v \in V,$$

gilt. Weiterhin existiert höchstens eine Minimallösung.

Wir betrachten nun einen elliptischen Differentialoperator zweiter Ordnung mit Divergenzstruktur

$$\tilde{L}u := - \sum_{i,k=1}^d \partial_i(a_{ik}\partial_k u) + a_0 u, \tag{1.3}$$

wobei

$$a_0(\mathbf{x}) \geq 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega.$$

Das Dirichlet-Problem hat die Form

$$\begin{aligned}\tilde{L}u &= f && \text{in } \Omega, \\ u &= g && \text{auf } \partial\Omega.\end{aligned}$$

Ist eine zulässige Funktion u_0 bekannt, die auf dem Rand mit g übereinstimmt, so ergibt sich durch die Transformation $w := u - u_0$

$$\begin{aligned}\tilde{L}w &= f_1 && \text{in } \Omega, \\ w &= 0 && \text{auf } \partial\Omega,\end{aligned}$$

mit $f_1 := f - \tilde{L}u_0$. Somit können wir im folgenden Verlauf o.B.d.A. von homogenen Randbedingungen ausgehen.

Satz 1.2.2. *Ist u eine klassische Lösung der Randwertaufgabe*

$$\begin{aligned}-\sum_{i,k=1}^d \partial_i(a_{ik}\partial_k u) + a_0 u &= f && \text{in } \Omega, \\ u &= 0 && \text{auf } \partial\Omega,\end{aligned}$$

so ist sie auch Lösung des Variationsproblems

$$J(v) := \int_{\Omega} \left[\frac{1}{2} \sum_{i,k=1}^d a_{ik} \partial_i v \partial_k v + \frac{1}{2} a_0 v^2 - f v \right] d\mathbf{x} \longrightarrow \min !$$

mit $v \in C^2(\Omega) \cap C^0(\overline{\Omega})$ und $v = 0$ auf $\partial\Omega$.

Als nächstes führen wir geeignete Bedingungen an die Bilinearform ein, um genauere Aussagen über die Eindeutigkeit der Lösung zu machen.

Definition 1.2.3. Wir betrachten einen Hilbert-Raum H mit einer Bilinearform $a : H \times H \rightarrow \mathbb{R}$. Diese Bilinearform heißt stetig, wenn ein $C > 0$ existiert mit

$$|a(u, v)| \leq C \|u\| \cdot \|v\|, \quad \forall u, v \in H.$$

Die Bilinearform a wird als H -elliptisch bezeichnet, wenn sie symmetrisch und stetig ist und ein $\alpha > 0$ existiert mit

$$a(v, v) \geq \alpha \|v\|^2, \quad \forall v \in H.$$

Mit H' wird der Raum der stetigen, linearen Funktionale auf dem normierten Raum H bezeichnet.

Satz 1.2.4 (Satz von Lax-Milgram). *Auf dem Hilbert-Raum H sei eine elliptische Bilinearform $a : H \times H \rightarrow \mathbb{R}$ gegeben. Weiterhin ist V eine abgeschlossene, konvexe Menge in H . Das Variationsproblem*

$$J(v) := \frac{1}{2}a(v, v) - \langle l, v \rangle \longrightarrow \min !$$

besitzt für jedes $l \in H'$ genau eine Lösung in V .

Bisher haben wir nur Lösungen in $C^2(\Omega) \cap C^0(\overline{\Omega})$ betrachtet. Für viele Problemstellungen ist jedoch der Sobolev-Raum geeigneter. Wir können somit den Lösungsbegriff erweitern.

Definition 1.2.5. Wir betrachten eine Funktion $u \in H_0^1(\Omega)$. Diese ist eine schwache Lösung der elliptischen Randwertaufgabe zweiter Ordnung mit homogenen Dirichlet-Randbedingungen

$$\begin{aligned} \tilde{L}u &= f & \text{in } \Omega, \\ u &= 0 & \text{auf } \partial\Omega, \end{aligned} \tag{1.4}$$

wenn

$$\int_{\Omega} \left[\sum_{i,k=1}^d a_{ik} \partial_i u \partial_k v + a_0 u v \right] d\mathbf{x} = (f, v)_{L_2(\Omega)}, \quad \forall v \in H_0^1(\Omega),$$

gilt.

Satz 1.2.6 (Existenzsatz). *Sei \tilde{L} ein elliptischer Differentialoperator zweiter Ordnung aus (1.3) mit $a_{ij} \in L_{\infty}(\Omega)$ und $f \in L_2(\Omega)$. Dann besitzt das Dirichlet-Problem (1.4) immer eine schwache Lösung in $H_0^1(\Omega)$. Außerdem ist diese Minimum des Variationsproblems*

$$\frac{1}{2} \int_{\Omega} \left[\sum_{i,k=1}^d a_{ik} \partial_i v \partial_k v + a_0 v v \right] d\mathbf{x} - (f, v)_{L_2(\Omega)} \longrightarrow \min !$$

in $H_0^1(\Omega)$.

1.3 Finite-Elemente-Methode

Ein Weg zur numerischen Lösung elliptischer Randwertaufgaben besteht darin, unseren Lösungsraum anzupassen. Wir suchen die Lösung nicht in $H_0^m(\Omega)$, sondern in einem endlichdimensionalen Unterraum $S_h \subset H_0^m(\Omega)$. In diesem Zusammenhang bezeichnet h für gewöhnlich den Diskretisierungsparameter.

Der Charakterisierungssatz 1.2.1 hilft uns, die Variationsaufgabe

$$J(v) := \frac{1}{2}a(v, v) - \langle l, v \rangle \longrightarrow \min_{S_h}! \quad (1.5)$$

zu berechnen. Es ist u_h eine Lösung von (1.5), wenn

$$a(u_h, v) = \langle l, v \rangle, \quad \forall v \in S_h. \quad (1.6)$$

Ist $\{\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n\}$ eine Basis von S_h , so ist (1.6) äquivalent zu

$$a(u_h, \varphi_i) = \langle l, \varphi_i \rangle, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Mit der Basis von S_h können wir den Ansatz wählen

$$u_h = \sum_{k=1}^n x_k \varphi_k,$$

und es folgt

$$\sum_{k=1}^n a(\varphi_k, \varphi_i) x_k = \langle l, \varphi_i \rangle, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Durch Umformung erhalten wir das Gleichungssystem

$$Ax = b,$$

mit $A_{ik} := a(\varphi_k, \varphi_i)$ und $b_i := \langle l, \varphi_i \rangle$. Wichtig ist es zu erkennen, dass die Matrix A positiv definit ist, wenn a eine elliptische Bilinearform ist

$$\begin{aligned} x^T Ax &= \sum_{i,k=1}^n x_i A_{ik} x_k \\ &= a \left(\sum_{k=1}^n x_k \varphi_k, \sum_{i=1}^n x_i \varphi_i \right) \\ &= a(u_h, u_h) \\ &\geq \alpha \|u_h\|^2. \end{aligned}$$

Somit folgt $x^T Ax > 0$ für $x \neq 0$. Dies ermöglicht es, bestimmte Verfahren zur Lösung des Gleichungssystems einzusetzen. Das folgende Lemma bietet eine einfache Fehlerabschätzung.

Lemma 1.3.1 (Céa-Lemma). *Es sei eine V -elliptische Bilinearform a gegeben mit $H_0^m(\Omega) \subset V \subset H^m(\Omega)$. Weiterhin sind u und u_h Lösungen der Variationsaufgabe (1.5) in V bzw. in $S_h \subset V$. Dann folgt die Abschätzung*

$$\|u - u_h\|_m \leq \frac{C}{\alpha} \inf_{v_h \in S_h} \|u - v_h\|_m.$$

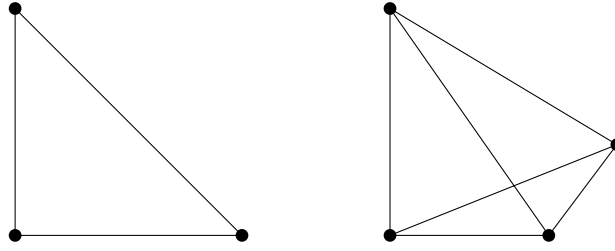


Abbildung 1.1: Lineares Dreieckelement und lineares Tetraederelement
 (• Vorgabe des Funktionswertes)

Das C ea-Lemma macht deutlich, dass es wichtig ist, einen geeigneten Funktionenraum zu w hlen, in dem die L sung u gut approximiert wird. In Anwendungen hat sich gezeigt, dass sich die Finite-Elemente-R ume eignen. Dabei wird das Gebiet Ω in endlich viele Teilgebiete zerlegt, und man benutzt Funktionen, die auf jedem Teilgebiet Polynome sind. Die Teilgebiete werden als Elemente bezeichnet, w hrend mit Finite-Elemente Funktionen gemeint sind. Folgende Definition gibt einige Bedingungen an die Zerlegung an. Wir beschr nken uns dabei auf den Fall $\Omega \subset \mathbb{R}^2$. Analog dazu existieren auch Bedingungen f r h here Dimensionen.

Definition 1.3.2. Erf llt eine Zerlegung $\mathcal{T} = \{T_1, T_2, \dots, T_m\}$ von Ω in Dreieckelemente folgende Eigenschaften, so wird sie als zul ssig bezeichnet:

- (i) $\overline{\Omega} = \bigcup_{i=1}^m T_i$
- (ii) Falls $T_i \cap T_j$ aus genau einem Punkt besteht, so ist dieser Eckpunkt von T_i und von T_j .
- (iii) Falls $T_i \cap T_j$ mit $i \neq j$ aus mehr als einem Punkt besteht, so ist die Schnittmenge eine Kante von T_i und von T_j .

Definition 1.3.3. Funktionen werden als Lagrange-Elemente bezeichnet, wenn zu einem Finite-Elemente-Raum S_h eine Menge von Punkten bekannt ist, so dass die finiten Elemente aus S_h eindeutig durch die Werte an diesen Punkten bestimmt sind. Eine nodale Basis wird durch die Funktionen gebildet, die an genau einem Punkt in S_h einen von Null verschiedenen Wert annehmen.

In unseren folgenden Betrachtungen verwenden wir nur lineare Ansatzfunktionen. Das Gebiet Ω liegt im \mathbb{R}^3 . Um eine nodale Basis zu erhalten, benutzen wir f r Ω lineare Tetraederelemente und f r $\partial\Omega$ lineare Dreieckelemente, siehe Abbildung 1.1. F r weitere Berechnungen ben tigen wir die folgenden Referenzelemente und die dazugeh rigen

Lagrange-Funktionen. Für das Referenzdreieck erhält man

$$\begin{aligned}\hat{\pi} &:= \{(x, y, z) : 0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1 - x\}, \\ \hat{L}_1(x, y) &= 1 - x - y, \\ \hat{L}_2(x, y) &= x, \\ \hat{L}_3(x, y) &= y,\end{aligned}\tag{1.7}$$

und für den Referenztetraeder

$$\begin{aligned}\hat{\tau} &:= \{(x, y, z) : 0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1 - x, 0 \leq z \leq 1 - x - y\}, \\ \hat{L}_1(x, y, z) &= 1 - x - y - z, \\ \hat{L}_2(x, y, z) &= x, \\ \hat{L}_3(x, y, z) &= y, \\ \hat{L}_4(x, y, z) &= z.\end{aligned}\tag{1.8}$$

Für ein beliebiges Element $\tau \in \Lambda$ existiert eine invertierbare lineare affine Abbildung $\varphi : \hat{\tau} \rightarrow \tau$ vom Referenztetraeder, und es gilt $L_i = \hat{L}_i \circ \varphi^{-1}$. Λ bezeichnet die Menge aller Tetraeder einer zulässigen Zerlegung. Weiterhin existiert eine invertierbare Matrix $B_\tau^T := \nabla \varphi$. Somit erhalten wir

$$\begin{aligned}\nabla L_i &= \nabla(\hat{L}_i \circ \varphi^{-1}) \\ &= \nabla \varphi^{-1}(\nabla \hat{L}_i \circ \varphi^{-1}).\end{aligned}$$

Durch $\text{Id} = \varphi \circ \varphi^{-1}$ ergibt sich $\text{Id} = \nabla \varphi^{-1}(\nabla \varphi \circ \varphi^{-1})$ und $\nabla \varphi^{-1} = (\nabla \varphi \circ \varphi^{-1})^{-1} = B^{-T}$. Daraus folgt

$$\nabla L_i = B^{-T} \nabla \hat{L}_i \circ \varphi^{-1}.\tag{1.9}$$

In dieser Arbeit bezeichnet I_G die Indexmenge aller Knoten in dem zu diskretisierenden Gebiet Ω . Die äußeren Knoten I_A sind alle Punkte auf der Oberfläche, und die inneren Knoten I_I ergeben sich durch $I_I = I_G \setminus I_A$. Schließlich gibt es noch die Indexmenge I_S , die die äußerste Schicht der inneren Knoten bezeichnet, $I_S = \{x \in I_I : \exists (x, y) \in E, y \in I_A\}$. E ist die Menge der Kanten zwischen den einzelnen Knoten. Zur Veranschaulichung dient Abbildung 1.2.

Im Folgenden ist B_τ die zugehörige invertierbare Transformationsmatrix und L_i das Lagrange-Polynom zum Knoten i von $\tau \in \Lambda$. Die Indexmenge $\Lambda_{i,j}$ bezeichnet alle Tetraeder, die den i -ten und j -ten Knoten als Ecke besitzen und Λ_i alle Tetraeder, die den i -ten Knoten als Ecke besitzen.

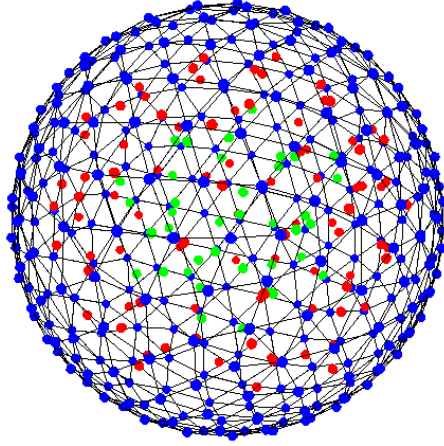


Abbildung 1.2: Diskretisierung einer Kugel mit den Mengen der äußeren Knoten $I_A = \{\text{blaue Knoten}\}$, Schichtknoten $I_S = \{\text{rote Knoten}\}$, inneren Knoten $I_I = \{\text{grüne Knoten}\} \cup I_S$ und der gesamten Knoten $I_G = I_A \cup I_I$

Für spätere Betrachtungen ist die Berechnung der Massematrix $\mathcal{M} = (\mathcal{M}_{ij})_{i,j \in I_G}$

$$\begin{aligned}
\mathcal{M}_{ij} &:= \int_{\Omega} \varphi_i \varphi_j d\mathbf{x} \\
&= \sum_{\tau \in \Lambda_{i,j}} \int_{\tau} L_i L_j d\mathbf{x} \\
&= \sum_{\tau \in \Lambda_{i,j}} |\det B_{\tau}| \int_{\hat{\tau}} \hat{L}_i \hat{L}_j d\hat{\mathbf{x}} \\
&= \sum_{\tau \in \Lambda_{i,j}} |\det B_{\tau}| \cdot \begin{cases} \frac{1}{60}, & i = j, \\ \frac{1}{120}, & i \neq j. \end{cases}
\end{aligned} \tag{1.10}$$

der Steifigkeitsmatrix $\mathcal{S} = (\mathcal{S}_{ij})_{i,j \in I_G}$ und $\mathcal{S}|_{\text{in}} = (\mathcal{S}_{ij})_{i,j \in I_I}$

$$\begin{aligned}
\mathcal{S}_{ij} &:= \int_{\Omega} \nabla \varphi_i^T \nabla \varphi_j d\mathbf{x} \\
&= \sum_{\tau \in \Lambda_{i,j}} \int_{\tau} \nabla L_i^T \nabla L_j d\mathbf{x} \\
&= \sum_{\tau \in \Lambda_{i,j}} |\det B_{\tau}| (B_{\tau}^{-T} \nabla \hat{L}_i)^T (B_{\tau}^{-T} \nabla \hat{L}_j) \int_{\hat{\tau}} d\hat{\mathbf{x}} \\
&= \sum_{\tau \in \Lambda_{i,j}} \frac{1}{6} |\det B_{\tau}| (B_{\tau}^{-T} \nabla \hat{L}_i)^T (B_{\tau}^{-T} \nabla \hat{L}_j),
\end{aligned} \tag{1.11}$$

und der Matrix $\mathcal{B} = (\mathcal{B}_{ij})_{i \in I_G, j \in I_I}$

$$\begin{aligned}
\mathcal{B}_{ij} &:= \int_{\Omega} \nabla \varphi_i \varphi_j \, d\mathbf{x} \\
&= \sum_{\tau \in \Lambda_{i,j}} \int_{\tau} \nabla L_i L_j \, d\mathbf{x} \\
&= \sum_{\tau \in \Lambda_{i,j}} |\det B_{\tau}| (B_{\tau}^{-T} \nabla \hat{L}_i) \int_{\hat{\tau}} \hat{L}_j \, d\hat{\mathbf{x}} \\
&= \sum_{\tau \in \Lambda_{i,j}} \frac{1}{24} |\det B_{\tau}| (B_{\tau}^{-T} \nabla \hat{L}_i),
\end{aligned} \tag{1.12}$$

nötig, wobei in unserem Fall $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ ist. Wir summieren dabei über die einzelnen Teilgebiete, die aus einer zulässigen Zerlegung entstehen. Anschließend transformieren wir auf die Referenzelemente. Die φ_i bezeichnen in unserem Fall lineare Ansatzfunktionen. Die Massematrix, die Steifigkeitsmatrix und die Matrix \mathcal{B} sind schwachbesetzte Matrizen und können zum Beispiel effizient per CRS (Compressed Row Storage) oder CCS (Compressed Column Storage) abgespeichert werden.

Zur Lösung von schwachbesetzten linearen Gleichungssystemen mit diesen Matrizen empfehlen sich Krylow-Unterraum-Verfahren. Diese Verfahren eignen sich durch ihre Robustheit und einfache Implementierbarkeit. Es sei angemerkt, dass die Matrizen \mathcal{S} und \mathcal{M} positiv definit sind. Somit eignet sich im Folgenden zum Beispiel das CG-Verfahren, um Gleichungssysteme mit der Matrix \mathcal{S} zu bestimmen. Zur Verbesserung der Konvergenzgeschwindigkeit ist es möglich, zusätzlich eine Vorkonditionierung zum Beispiel mit hierarchischer LU -Zerlegung durchzuführen.

Eine weitere Möglichkeit zur Lösung der Gleichungssysteme ist der Einsatz einer hierarchischen LU -Zerlegung mit Vorwärts-Rückwärtssubstitution als direkten Löser. Details dazu befinden sich in Kapitel 4.2. Es konnte gezeigt werden, dass dies in $\mathcal{O}(n \log^3 n)$ Operationen möglich ist [6].

Weiterhin benötigen wir später die Berechnung des folgenden Vektors $\mathcal{Z} = (\mathcal{Z}_i)_{i \in I_G}$

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z}_i &:= \int_{\Omega} \mathbf{f} \varphi_i \, d\mathbf{x} \\
&= \sum_{\tau \in \Lambda_i} \int_{\tau} \mathbf{f} L_i \, d\mathbf{x} \\
&= \sum_{\tau \in \Lambda_i} |\det B_{\tau}| \int_{\hat{\tau}} \hat{\mathbf{f}} \hat{L}_i \, d\hat{\mathbf{x}},
\end{aligned} \tag{1.13}$$

mit $\mathbf{f} \in L^2(\Omega; \mathbb{R}^3)$. Da die Integration in (1.13) über das Referenzelement erfolgt, bietet sich die Gauß-Integration an.

1.4 Randelemente-Methode

Sei folgender elliptischer Differentialoperator zweiter Ordnung

$$\begin{aligned} (\hat{L}u)(\mathbf{x}) &= - \sum_{i,j=1}^d \frac{\partial}{\partial x_j} \left[a_{ji}(\mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial x_i} u(\mathbf{x}) \right] \\ &= -\nabla \cdot [A(\mathbf{x}) \nabla u(\mathbf{x})] \end{aligned}$$

gegeben, mit Koeffizienten a_{ji} wie in Gleichung (1.1). Durch Multiplikation des elliptischen Differentialoperators mit einer hinreichend glatten Testfunktion v und Integration über Ω ergibt sich

$$\int_{\Omega} (\hat{L}u)(\mathbf{x}) v(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = - \int_{\Omega} \nabla \cdot [A(\mathbf{x}) \nabla u(\mathbf{x})] v(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}. \quad (1.14)$$

Wir betrachten den Integralsatz von Gauß mit einer Funktion $\boldsymbol{\psi} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^d$,

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \boldsymbol{\psi}(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = \int_{\partial\Omega} \boldsymbol{\psi}(\mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\nu} \, d\sigma(\mathbf{x}).$$

Mit $\boldsymbol{\psi}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\theta}(\mathbf{x}) \vartheta(\mathbf{x})$ und hinreichend oft differenzierbaren Funktionen $\boldsymbol{\theta} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^d$ und $\vartheta : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ erhalten wir die Formel für die partielle Integration

$$\int_{\Omega} \vartheta(\mathbf{x}) \nabla \cdot \boldsymbol{\theta}(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = \int_{\partial\Omega} \vartheta(\mathbf{x}) \boldsymbol{\theta}(\mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\nu} \, d\sigma(\mathbf{x}) - \int_{\Omega} \boldsymbol{\theta}(\mathbf{x}) \cdot \nabla \vartheta(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}. \quad (1.15)$$

Es bezeichnet $\boldsymbol{\nu}$ die äußere Einheitsnormale auf $\partial\Omega$. Somit ergibt sich durch Gleichung (1.14)

$$\int_{\Omega} (\hat{L}u)(\mathbf{x}) v(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega} [A(\mathbf{x}) \nabla u(\mathbf{x})] \cdot \nabla v(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} - \int_{\partial\Omega} v(\mathbf{x}) [A(\mathbf{x}) \nabla u(\mathbf{x})] \cdot \boldsymbol{\nu} \, d\sigma(\mathbf{x})$$

und wir definieren die symmetrische Bilinearform

$$\hat{a}(u, v) := \int_{\Omega} [A(\mathbf{x}) \nabla u(\mathbf{x})] \cdot \nabla v(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}.$$

Dadurch erhalten wir aus Symmetriegründen

$$\begin{aligned} \hat{a}(u, v) &= \int_{\Omega} (\hat{L}u)(\mathbf{x}) v(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} + \int_{\partial\Omega} v(\mathbf{x}) [A(\mathbf{x}) \nabla u(\mathbf{x})] \cdot \boldsymbol{\nu} \, d\sigma(\mathbf{x}) \\ &= \int_{\Omega} (\hat{L}v)(\mathbf{x}) u(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} + \int_{\partial\Omega} u(\mathbf{x}) [A(\mathbf{x}) \nabla v(\mathbf{x})] \cdot \boldsymbol{\nu} \, d\sigma(\mathbf{x}) \end{aligned}$$

und es folgt

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} (\hat{L}v)(\mathbf{y}) u(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} &= \int_{\partial\Omega} v(\mathbf{y}) [A(\mathbf{y}) \nabla u(\mathbf{y})] \cdot \boldsymbol{\nu} \, d\sigma(\mathbf{y}) - \int_{\partial\Omega} u(\mathbf{y}) [A(\mathbf{y}) \nabla v(\mathbf{y})] \cdot \boldsymbol{\nu} \, d\sigma(\mathbf{y}) \\ &\quad + \int_{\Omega} (\hat{L}u)(\mathbf{y}) v(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y}. \end{aligned}$$

Falls es möglich ist, für $\mathbf{x} \in \Omega$ eine Funktion $v(\mathbf{y}) := F(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ zu finden mit

$$\int_{\Omega} (L_{\mathbf{y}}F)(\mathbf{x}, \mathbf{y}) u(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} = u(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \Omega, \quad (1.16)$$

so erhalten wir für $\mathbf{x} \in \Omega$ die Darstellungsformel

$$\begin{aligned} u(\mathbf{x}) &= \int_{\partial\Omega} F(\mathbf{x}, \mathbf{y}) [A(\mathbf{y}) \nabla u(\mathbf{y})] \cdot \boldsymbol{\nu} \, d\sigma(\mathbf{y}) - \int_{\partial\Omega} u(\mathbf{y}) (A(\mathbf{y}) \nabla F(\mathbf{y})) \cdot \boldsymbol{\nu} \, d\sigma(\mathbf{y}) \\ &\quad + \int_{\Omega} (Lu)(\mathbf{y}) F(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \, d\mathbf{y}. \end{aligned} \quad (1.17)$$

Nun beschränken wir uns auf die Betrachtung der harmonischen Funktionen, um deren Eigenschaften für spätere Berechnungen auszunutzen.

Definition 1.4.1. Eine zweimal stetig differenzierbare Funktion $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ heißt harmonisch in Ω , wenn

$$\Delta u(\mathbf{x}) = 0 \quad (1.18)$$

für alle $\mathbf{x} \in \Omega$ gilt.

Es wird deutlich, dass sich die Darstellungsformel bei einer harmonischen Funktion vereinfacht zu

$$u(\mathbf{x}) = \int_{\partial\Omega} F(\mathbf{x}, \mathbf{y}) [A(\mathbf{y}) \nabla u(\mathbf{y})] \cdot \boldsymbol{\nu} \, d\sigma(\mathbf{y}) - \int_{\partial\Omega} u(\mathbf{y}) (A(\mathbf{y}) \nabla F(\mathbf{y})) \cdot \boldsymbol{\nu} \, d\sigma(\mathbf{y}).$$

Somit sind wir in der Lage, die Funktion u nur über Werte am Rand zu bestimmen. Vorausgesetzt ist dabei, dass eine Funktion $v(\mathbf{y}) := F(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ existiert, welche die Bedingung (1.16) erfüllt.

Im Gegensatz zur Finite-Elemente-Methode versuchen wir nicht $(Lu)(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x})$ zu diskretisieren, sondern $u(\mathbf{x}) = (L^{-1}f)(\mathbf{x})$. Somit bleibt es uns erspart, ein Gleichungssystem zu lösen. Dies ist vor allem bei Differentialoperatoren mit mehreren rechte-Seiten-Funktionen $f_i(\mathbf{x})$, $i \in \mathbb{N}$, wie sie zum Beispiel bei Iterationsverfahren vorkommen, von Vorteil. Weiterhin müssen wir das Integral nur auf dem Rand und nicht etwa auf dem gesamten Gebiet Ω auswerten.

Die Bestimmung einer Funktion im Inneren über die Werte am Rand wird als Randelemente-Methode oder im Englischen als boundary element method (BEM) bezeichnet.

Beispiel 1.4.2. Sei eine harmonische Funktion u auf dem offenen Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ mit den folgenden Sprungbedingungen,

$$\begin{aligned} \Delta u &= 0, \quad \mathbf{x} \in \Omega \cup \overline{\Omega}^c, \\ [u] |_{\partial\Omega} &= 0, \\ \left[\frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{\nu}} \right] \Big|_{\partial\Omega} &= g, \end{aligned} \quad (1.19)$$

und einer Funktion $g : \partial\Omega \rightarrow \mathbb{R}$ gegeben. Der Sprung $[v]|_{\partial\Omega}$ am Rand von Ω ist definiert durch

$$[v]|_{\partial\Omega}(\mathbf{x}) = \lim_{\substack{\mathbf{y} \rightarrow \mathbf{x} \\ \mathbf{y} \in \overline{\Omega}^c}} v(\mathbf{y}) - \lim_{\substack{\mathbf{y} \rightarrow \mathbf{x} \\ \mathbf{y} \in \Omega}} v(\mathbf{y}).$$

Es bezeichnet $\overline{\Omega}^c$ das Komplement von $\overline{\Omega}$. Die Lösung von (1.19) ist

$$u(\mathbf{x}) = \int_{\partial\Omega} N(\mathbf{x} - \mathbf{y}) g(\mathbf{y}) \, d\sigma(\mathbf{y}), \quad (1.20)$$

mit dem Newtonpotential $N(\mathbf{x}) = -\frac{1}{4\pi} \|\mathbf{x}\|_2^{-1}$, siehe [7]. Somit kann man u durch Auswertung des schwach singulären Integrals auf dem Rand (1.20) bestimmen.

Kapitel 2

Das Landau-Lifschitz-Modell

Die mikromagnetische Energie ist gegeben durch

$$E(\mathbf{m}) := E_a(\mathbf{m}) + E_z(\mathbf{m}) + E_e(\mathbf{m}) + E_s(\mathbf{m}) \quad (2.1)$$

und hängt von der Magnetisierung $\mathbf{m} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$ ab. Sie setzt sich zusammen aus der anisotropen Energie E_a , der Zeeman-Energie E_z , der Austauschenergie E_e und der Streufeldenergie E_s . In den folgenden Abschnitten werden diese Teilenergien näher beschrieben. $\Omega \subset \mathbb{R}^3$ bezeichnet ein beschränktes Lipschitz-Gebiet. In Anwendungen entspricht es der Ausdehnung des Magneten. Außerhalb dieses Gebietes wird die Magnetisierung auf Null gesetzt, somit gilt $\mathbf{m}(\mathbf{x}) := 0$ für $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 \setminus \Omega$. Die Magnetisierung ist normiert und wir erhalten die punktweise Nebenbedingung

$$\|\mathbf{m}(\mathbf{x})\|_2 = 1, \quad \mathbf{x} \in \Omega.$$

In den nachfolgenden Abschnitten werden die einzelnen Summanden näher betrachtet und Wege zur Berechnung erläutert.

2.1 Zeeman-Energie

Die Zeeman-Energie

$$E_z(\mathbf{m}) := -\mu_0 \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{m} \, d\mathbf{x} \quad (2.2)$$

beschreibt das Zusammenspiel mit dem äußeren Magnetfeld $\mathbf{f} \in L_2(\Omega, \mathbb{R}^3)$. Die magnetische Feldkonstante beträgt $\mu_0 = 4 \cdot 10^{-7} \pi$. Durch die Eigenschaften des Skalarproduktes leistet diese Energie keinen Beitrag, wenn \mathbf{f} und \mathbf{m} senkrecht aufeinander stehen. Die Berechnung erfolgt durch Diskretisierung mittels stückweise linearer Ansatzfunktionen φ_i . Somit wird die Magnetisierung dargestellt durch

$$\mathbf{m} = \sum_{i \in I_G} \alpha_i \varphi_i. \quad (2.3)$$

Man erhält somit

$$\begin{aligned}\int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{m} \, d\mathbf{x} &= \int_{\Omega} \sum_{i \in I_G} \mathbf{f} \cdot \boldsymbol{\alpha}_i \varphi_i \, d\mathbf{x} \\ &= \sum_{i \in I_G} \boldsymbol{\alpha}_i \cdot \mathbf{Z}_i.\end{aligned}\tag{2.4}$$

Zur Berechnung von (2.4) kann man wie in (1.13) vorgehen.

Die Ableitung der Zeeman-Energie erhält man analog zum obigen Fall (2.2) durch

$$E'_z(\mathbf{m})(\mathbf{v}) = -\mu_0 \partial_{\mathbf{m}} \left(\int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{m} \, d\mathbf{x} \right) (\mathbf{v}) = -\mu_0 \int_{\Omega} \mathbf{f} \cdot \mathbf{v} \, d\mathbf{x}.\tag{2.5}$$

Die Richtung der Ableitung ist gegeben durch

$$\mathbf{v} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3, \quad \mathbf{v} = \sum_{i \in I_G} \gamma_i \varphi_i,\tag{2.6}$$

und kann ebenso durch stückweise lineare Ansatzfunktionen dargestellt werden.

2.2 Anisotrope Energie

Die anisotrope Energie ergibt sich durch die Integration über die anisotrope Dichte $\phi \in C^\infty(\mathbb{R}^3, \mathbb{R}^+)$,

$$E_a(\mathbf{m}) := K_u \int_{\Omega} \phi(\mathbf{m}) \, d\mathbf{x}\tag{2.7}$$

mit K_u als uniaxiale Anisotropiekonstante. Dabei erhält man ϕ durch die Eigenschaften des zu modellierenden Materials auf einem kristallinen Level. In dieser Arbeit wird der Einfachheit halber ein Material mit nur einer kristallographischen Achse angenommen, z.B. Kobalt. Die anisotrope Dichte hat dabei die Form

$$\phi(\mathbf{m}) = 1 - (\mathbf{m} \cdot \mathbf{e})^2,$$

siehe [8], wobei $\mathbf{e} \in \mathbb{R}^3$ der Einheitsvektor der Elementarzelle ist. Somit erhält man

$$\begin{aligned}\int_{\Omega} \phi(\mathbf{m}) \, d\mathbf{x} &= K_u \int_{\Omega} 1 - (\mathbf{m} \cdot \mathbf{e})^2 \, d\mathbf{x} \\ &= K_u \int_{\Omega} d\mathbf{x} - K_u \sum_{i,j \in I_G} (\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \mathbf{e})(\boldsymbol{\alpha}_j \cdot \mathbf{e}) \int_{\Omega} \varphi_i \varphi_j \, d\mathbf{x} \\ &= K_u \left(|\Omega| - \sum_{i,j \in I_G} (\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \mathbf{e})(\boldsymbol{\alpha}_j \cdot \mathbf{e}) \mathcal{M}_{ij} \right)\end{aligned}\tag{2.8}$$

mit $|\Omega|$ als Volumen von Ω . Die Massematrix \mathcal{M} ist in (1.10) beschrieben.

Bei der Ableitung der anisotropen Energie können wir die Berechnung auf eine Verallgemeinerung von (2.8) zurückführen,

$$\begin{aligned}
\partial_{\mathbf{m}} \left(K_u \int_{\Omega} \phi(\mathbf{m}) \, d\mathbf{x} \right) (\mathbf{v}) &= K_u \partial_{\mathbf{m}} \left(\int_{\Omega} 1 - (\mathbf{m} \cdot \mathbf{e})^2 \, d\mathbf{x} \right) (\mathbf{v}) \\
&= -2K_u \int_{\Omega} (\mathbf{m} \cdot \mathbf{e})(\mathbf{v} \cdot \mathbf{e}) \, d\mathbf{x} \\
&= -2K_u \int_{\Omega} \left(\sum_{i \in I_G} \alpha_i \cdot \mathbf{e} \varphi_i \right) \left(\sum_{j \in I_G} \gamma_j \cdot \mathbf{e} \varphi_j \right) \, d\mathbf{x} \\
&= -2K_u \sum_{i,j \in I_G} (\alpha_i \cdot \mathbf{e})(\gamma_j \cdot \mathbf{e}) \mathcal{M}_{ij}
\end{aligned} \tag{2.9}$$

mit \mathbf{v} wie in (2.6).

2.3 Austauschenergie

Eine wesentliche Eigenschaft von ferromagnetischen Materialien ist, dass die magnetischen Momente eine parallele Ordnung aufweisen. Diese Ordnung wird durch die Austauschenergie

$$E_e(\mathbf{m}) := c_{\text{ex}} \int_{\Omega} \|\nabla \mathbf{m}\|_F^2 \, d\mathbf{x} \tag{2.10}$$

beschrieben. Es ist zu beachten, dass $\nabla \mathbf{m}$ eine 3×3 -Matrix ist, und es sich in (2.10) um die Frobeniusnorm handelt. Die Austauschenergie wird durch die Austauschkonstante c_{ex} skaliert. Man erhält durch Umformung

$$\begin{aligned}
c_{\text{ex}} \int_{\Omega} \|\nabla \mathbf{m}\|_F^2 \, d\mathbf{x} &= c_{\text{ex}} \int_{\Omega} \text{spur} (\nabla \mathbf{m}^T \nabla \mathbf{m}) \, d\mathbf{x} \\
&= c_{\text{ex}} \int_{\Omega} \sum_{i,j \in I_G} \text{spur} (\nabla \varphi_i \alpha_i \cdot \alpha_j \nabla \varphi_j^T) \, d\mathbf{x} \\
&= c_{\text{ex}} \int_{\Omega} \sum_{i,j \in I_G} \alpha_i \cdot \alpha_j \nabla \varphi_i^T \nabla \varphi_j \, d\mathbf{x} \\
&= c_{\text{ex}} \sum_{i,j \in I_G} \alpha_i \cdot \alpha_j \mathcal{S}_{ij}.
\end{aligned}$$

Die Berechnung der schwachbesetzten Steifigkeitsmatrix \mathcal{S} ist in (1.11) gegeben.

Die Ableitung der Austauschenergie lässt sich analog zu (2.10) bestimmen

$$\begin{aligned}
c_{\text{ex}} \partial_{\mathbf{m}} \left(\int_{\Omega} \|\nabla \mathbf{m}\|_F^2 \, d\mathbf{x} \right) (\mathbf{v}) &= c_{\text{ex}} \partial_{\mathbf{m}} \left(\int_{\Omega} \text{spur} (\nabla \mathbf{m}^T \nabla \mathbf{m}) \, d\mathbf{x} \right) (\mathbf{v}) \\
&= c_{\text{ex}} \partial_{\mathbf{m}} \left(\int_{\Omega} \sum_{i,j=1}^3 (\partial_i \mathbf{m}_j)^2 \, d\mathbf{x} \right) (\mathbf{v}) \\
&= c_{\text{ex}} \int_{\Omega} \sum_{i=1}^3 2(\partial_i \mathbf{m})(\partial_i \mathbf{v}) \, d\mathbf{x} \\
&= 2 c_{\text{ex}} \sum_{i=1}^3 \int_{\Omega} \sum_{j,l \in I_G} \alpha_j \cdot \gamma_l (\partial_i \varphi_j \partial_i \varphi_l) \, d\mathbf{x} \\
&= 2 c_{\text{ex}} \sum_{j,l \in I_G} \alpha_j \cdot \gamma_l \mathcal{S}_{jl},
\end{aligned} \tag{2.11}$$

mit der Darstellung für \mathbf{v} aus (2.6).

2.4 Streufeldenergie

Ein magnetisierter Körper erzeugt ein Magnetfeld, welches in diesem Zusammenhang als Streufeld bezeichnet wird. Unter der Annahme von Abwesenheit von elektrischem Strom und elektrischen Ladungen vereinfachen sich die Maxwellgleichungen für das Streufeld \mathbf{H}_s und die magnetische Induktion \mathbf{B} zu

$$\text{div } \mathbf{B} = 0, \tag{2.12}$$

$$\nabla \times \mathbf{H}_s = 0. \tag{2.13}$$

Die Energie des Streufeldes ergibt sich durch

$$E_s := \frac{\mu_0}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \|\mathbf{H}_s\|_2^2 \, d\mathbf{x}. \tag{2.14}$$

Durch Gleichung (2.13) erfüllt \mathbf{H}_s die Integrabilitätsbedingung. Somit existiert nach dem Satz von Poincaré auf einem einfach zusammenhängenden Gebiet eine skalare Funktion u mit $\mathbf{H}_s = -\nabla u$. Daher wird u als magnetisches Potential bezeichnet. Für die Streufeldenergie ergibt sich

$$E_s = \frac{\mu_0}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \|\nabla u\|_2^2 \, d\mathbf{x}. \tag{2.15}$$

Weiterhin existiert die Beziehung zwischen magnetischer Induktion, magnetischem Feld und Magnetisierung

$$\mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{H}_s + \mathbf{m}).$$

Durch Einsetzen in (2.12) erhält man

$$\operatorname{div}(-\nabla u + \mathbf{m}) = 0 \quad \text{in } \mathbb{R}^3, \quad (2.16)$$

einen Zusammenhang zwischen magnetischem Potential und Magnetisierung. Unser Ziel soll sein, im folgenden Kapitel eine explizite Darstellung für u zu finden.

Wichtig ist es zu erkennen, dass bei dieser Art der Berechnung die Streufeldenergie tatsächlich nur von der Magnetisierung \mathbf{m} abhängt. Dies wird durch folgende Überlegungen verdeutlicht. Betrachtet man Gleichung (2.16), so ist das Streufeld bis auf einen Summanden eindeutig bestimmt $\mathbf{H}'_s = \mathbf{H}_s + \operatorname{rot} \phi$. Setzt man \mathbf{H}'_s in Gleichung (2.13) ein, so erhält man $\operatorname{rot}(\operatorname{rot} \phi) = 0$. Daraus folgt die Existenz eines Potentials w mit $\nabla w = \operatorname{rot} \phi$. Das Streufeld hat dann die Form $\mathbf{H}'_s = -\nabla u + \nabla w$ und es gilt $\Delta w = 0$. Durch partielle Integration ergibt sich

$$\begin{aligned} \frac{\mu_0}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \|\mathbf{H}'_s\|_2^2 d\mathbf{x} &= \frac{\mu_0}{2} \int_{\mathbb{R}^3} (-\nabla u + \nabla w)(-\nabla u + \nabla w) d\mathbf{x} \\ &= \frac{\mu_0}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \nabla u \cdot \nabla u - 2\nabla u \cdot \nabla w + \nabla w \cdot \nabla w d\mathbf{x} \\ &= \frac{\mu_0}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \nabla u \cdot \nabla u d\mathbf{x} \\ &= \frac{\mu_0}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \|\mathbf{H}_s\|_2^2 d\mathbf{x} \\ &= E_s. \end{aligned}$$

Somit ist die Streufeldenergie (2.15) eindeutig durch \mathbf{m} bestimmt.

Kapitel 3

Die Berechnung der Streufeldenergie

Die Berechnung der Streufeldenergie ist bei der Bestimmung der mikromagnetischen Energie am anspruchsvollsten. Der Grund ist hierbei die Fernwirkung von Magneten. Wir erhalten somit durch einen nicht-lokalen Operator großdimensionierte, vollbesetzte Systeme. Man ist gezwungen, einen anderen Ansatz als bei den bisherigen Energien zu wählen. Im folgenden Kapitel werden wir verschiedene Ansätze vorstellen.

3.1 Verschiedene Ansätze

Neben der Beziehung zwischen Magnetisierung und magnetischem Potential

$$\Delta u = \begin{cases} \nabla \cdot \mathbf{m}, & \text{in } \Omega, \\ 0, & \text{in } \overline{\Omega}^c, \end{cases} \quad (3.1)$$

existieren in unserem Modell [2] die Sprungbedingungen

$$\begin{aligned} [u] |_{\partial\Omega} &= 0, \\ \left[\frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{\nu}} \right] \Big|_{\partial\Omega} &= -\mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\nu}. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Wir erhalten somit ein Randwertproblem mit der Lösung

$$u(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} \nabla N(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \cdot \mathbf{m}(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y},$$

siehe [2].

Lemma 3.1.1. *Aus Gleichung (3.1) mit den Sprungbedingungen (3.2) folgt*

$$\int_{\mathbb{R}^3} \nabla u \cdot \nabla w \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega} \mathbf{m} \cdot \nabla w \, d\mathbf{x}, \quad \forall w \in H^1(\mathbb{R}^3), \quad (3.3)$$

mit $u \in H^1(\mathbb{R}^3)$.

Beweis: Wenden wir das $L_2(\mathbb{R}^3)$ -Skalarprodukt mit einer Testfunktion $w \in L_2(\mathbb{R}^3)$ auf (3.1) an, so erhalten wir

$$\int_{\Omega} w \Delta u \, d\mathbf{x} + \underbrace{\int_{\overline{\Omega}^c} w \Delta u \, d\mathbf{x}}_{=0} = \int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{m} w \, d\mathbf{x} + \underbrace{\int_{\overline{\Omega}^c} \nabla \cdot \mathbf{m} w \, d\mathbf{x}}_{=0}.$$

Durch Anwendung mehrdimensionaler partieller Integration (1.15) auf beide Seiten der Gleichung ergibt sich

$$\int_{\Omega} \mathbf{m} \cdot \nabla w \, d\mathbf{x} - \int_{\partial\Omega} w \mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\nu} \, d\sigma(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla w \, d\mathbf{x} - \int_{\partial\Omega} w \nabla u \cdot \boldsymbol{\nu} \, d\sigma(\mathbf{x}) \quad (3.4)$$

$$0 = \int_{\overline{\Omega}^c} \nabla u \cdot \nabla w \, d\mathbf{x} - \int_{\partial\overline{\Omega}^c} w \nabla u \cdot \boldsymbol{\nu} \, d\sigma(\mathbf{x}). \quad (3.5)$$

Wir addieren die Gleichungen (3.4) und (3.5) und erhalten

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \mathbf{m} \cdot \nabla w \, d\mathbf{x} - \int_{\partial\Omega} w \mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\nu} \, d\sigma(\mathbf{x}) &= \int_{\mathbb{R}^3} \nabla u \cdot \nabla w \, d\mathbf{x} - \int_{\partial\Omega} w \nabla u \cdot \boldsymbol{\nu} \, d\sigma(\mathbf{x}) \\ &\quad - \int_{\partial\overline{\Omega}^c} w \nabla u \cdot \boldsymbol{\nu} \, d\sigma(\mathbf{x}). \end{aligned}$$

Die zweite Sprungbedingung aus (3.2) liefert sofort

$$\int_{\Omega} \mathbf{m} \cdot \nabla w \, d\mathbf{x} = \int_{\mathbb{R}^3} \nabla u \cdot \nabla w \, d\mathbf{x}.$$

Durch Einschränkung des Potentials auf $u \in H^1(\mathbb{R}^3) \subset L_2(\mathbb{R}^3)$ sichern wir die erste Bedingung aus (3.2). \square

Durch Lemma 3.1.1 sind wir in der Lage, die Streufeldenergie auf einem beschränkten Gebiet zu berechnen. Man erhält mit (3.3) und $w = u$ für die Streufeldenergie (2.15)

$$E_s(\mathbf{m}) = \frac{\mu_0}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \nabla u \cdot \nabla u \, d\mathbf{x} = \frac{\mu_0}{2} \int_{\Omega} \mathbf{m} \cdot \nabla u \, d\mathbf{x}.$$

Die Ableitung ist mit der Richtung der Ableitung \mathbf{v} aus (2.6)

$$\begin{aligned} E'_s(\mathbf{m})(\mathbf{v}) &= \partial_{\mathbf{m}} \left(\frac{\mu_0}{2} \int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{H}_s(\mathbf{m}) \cdot \mathbf{H}_s(\mathbf{m}) \, d\mathbf{x} \right) \\ &= \mu_0 \int_{\mathbb{R}^3} \mathbf{H}_s(\mathbf{m}) \cdot \mathbf{H}_s(\mathbf{v}) \, d\mathbf{x} \\ &= -\mu_0 \int_{\mathbb{R}^3} \nabla u \cdot \mathbf{H}_s(\mathbf{v}) \, d\mathbf{x} \\ &= \mu_0 \int_{\Omega} \mathbf{v} \cdot \nabla u \, d\mathbf{x}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Für die Gleichung (3.1) mit den Bedingungen (3.2) gibt es weitere Ansätze zur Lösung. Einer besteht darin, das Potential u geschickt in zwei Summanden $u = u_1 + u_2$ zu zerlegen. So werden in [2] folgende Zerlegungen vorgeschlagen

$$\begin{aligned}\Delta u_1 &= \operatorname{div} \mathbf{m}, & \mathbf{x} &\in \Omega, \\ \frac{\partial u_1}{\partial \boldsymbol{\nu}} &= 0, & \mathbf{x} &\in \partial\Omega,\end{aligned}\tag{3.7}$$

und

$$\begin{aligned}\Delta u_2 &= 0, & \mathbf{x} &\in \Omega, \\ [u_2] \big|_{\partial\Omega} &= u_1, \\ \left[\frac{\partial u_2}{\partial \boldsymbol{\nu}} \right] \bigg|_{\partial\Omega} &= 0.\end{aligned}\tag{3.8}$$

Die Lösung zu (3.8) ist das Doppelschichtpotential

$$u_2(\mathbf{x}) = \int_{\partial\Omega} u_1(\mathbf{y}) \frac{\partial N}{\partial \boldsymbol{\nu}}(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \, d\sigma(\mathbf{y}),$$

siehe [7].

Eine andere Zerlegung $u = u_1 + u_2$ wird in [9] vorgestellt,

$$\begin{aligned}\Delta u_1 &= \operatorname{div} \mathbf{m}, & \mathbf{x} &\in \Omega, \\ u_1 &= 0, & \mathbf{x} &\in \partial\Omega,\end{aligned}\tag{3.9}$$

und

$$\begin{aligned}\Delta u_2 &= 0, & \mathbf{x} &\in \Omega \cup \overline{\Omega}^c, \\ [u_2] \big|_{\partial\Omega} &= 0, \\ \left[\frac{\partial u_2}{\partial \boldsymbol{\nu}} \right] \bigg|_{\partial\Omega} &= g,\end{aligned}\tag{3.10}$$

wobei $g := -\mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\nu} + \frac{\partial u_1}{\partial \boldsymbol{\nu}}$. Die Lösung von (3.10) ist

$$u_2(\mathbf{x}) = \int_{\partial\Omega} N(\mathbf{x} - \mathbf{y}) g(\mathbf{y}) \, d\sigma(\mathbf{y}),\tag{3.11}$$

siehe [10].

Definition 3.1.2. Ist das Integral $\int_{\Omega} f(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}$ in $\mathbf{y} \in \Omega$ uneigentlich, so bezeichnet

$$\operatorname{CH} \int_{\Omega} f(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} := \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\Omega \setminus S_{\varepsilon}(\mathbf{y})} f(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}$$

den cauchyschen Hauptwert. $S_{\varepsilon}(\mathbf{y})$ ist dabei eine Kugel um den Punkt \mathbf{y} mit dem Radius ε .

Wendet man den Gradienten auf das Einfachschichtpotential an, so lassen sich Integral und Gradient vertauschen

$$\begin{aligned}\nabla u_2(\mathbf{x}) &= \nabla \int_{\partial\Omega} N(\mathbf{x} - \mathbf{y})g(\mathbf{y}) \, d\sigma(\mathbf{y}) \\ &= \text{CH} \int_{\partial\Omega} \nabla N(\mathbf{x} - \mathbf{y})g(\mathbf{y}) \, d\sigma(\mathbf{y}),\end{aligned}\tag{3.12}$$

für einen Beweis siehe [11]. Mit (3.9) erhalten wir ein Dirichlet-Randwertproblem, so dass wir mit Hilfe von u_1 die skalare Funktion u_2 innerhalb des Gebietes bestimmen können.

Bei der Implementierung fiel die Entscheidung zu Gunsten des zweiten Ansatzes, (3.9) und (3.10), da dort anstelle eines Doppelschichtpotentials ein Einfachschichtpotential auftritt. Dies ermöglicht eine einfachere numerische Handhabung. Ein großer Nachteil des Doppelschichtpotentials ist die Abhängigkeit von der Geometrie durch die Normalenableitung. Selbst bei einfachen Gebieten wie einem Würfel entstehen Sprünge, die durch das Einfachschichtpotential vermieden werden können. Für unsere weiteren Betrachtungen spielt auch eine Rolle, dass das Einfachschichtpotential ein schwach singuläres Integral ist. Somit ist es möglich, die Singularität durch eine Transformation zu glätten und Standardintegrationsroutinen zu verwenden.

Die Streufeldenergie lässt sich durch den Ansatz $u = u_1 + u_2$ aus (3.11) und (3.12) umformen zu

$$\begin{aligned}E_s(\mathbf{m}) &= \frac{\mu_0}{2} \int_{\Omega} \mathbf{m} \cdot \nabla u \, d\mathbf{x} \\ &= \frac{\mu_0}{2} \int_{\Omega} \mathbf{m} \cdot \nabla u_1 \, d\mathbf{x} + \frac{\mu_0}{2} \text{CH} \int_{\Omega} \int_{\partial\Omega} \mathbf{m}(\mathbf{x}) \cdot \nabla N(\mathbf{x} - \mathbf{y})g(\mathbf{y}) \, d\sigma(\mathbf{y}) \, d\mathbf{x}.\end{aligned}$$

Lemma 3.1.3. *Sei $\mathbf{m} \in H(\text{div}; \Omega)$, so lässt sich folgendes Integral durch schwach singuläre Integrale ausdrücken*

$$\text{CH} \int_{\Omega} \mathbf{m}(\mathbf{x}) \cdot \nabla N(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \, d\mathbf{x} = \int_{\partial\Omega} N(\mathbf{x} - \mathbf{y})\mathbf{m}(\mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\nu} \, d\sigma(\mathbf{x}) - \int_{\Omega} N(\mathbf{x} - \mathbf{y})\text{div} \, \mathbf{m} \, d\mathbf{x}.$$

Beweis: Durch mehrdimensionale partielle Integration (1.15) erhalten wir

$$\begin{aligned}\text{CH} \int_{\Omega} \mathbf{m}(\mathbf{x}) \cdot \nabla N(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \, d\mathbf{x} &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\Omega \setminus S_{\varepsilon}(\mathbf{y})} \mathbf{m}(\mathbf{x}) \cdot \nabla N(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \, d\mathbf{x} \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\partial\Omega \cup \partial S_{\varepsilon}(\mathbf{y})} N(\mathbf{x} - \mathbf{y})\mathbf{m}(\mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\nu} \, d\sigma(\mathbf{x})\end{aligned}\tag{3.13}$$

$$- \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\Omega \setminus S_{\varepsilon}(\mathbf{y})} N(\mathbf{x} - \mathbf{y})\text{div} \, \mathbf{m} \, d\mathbf{x}.\tag{3.14}$$

Die Integrale (3.13) und (3.14) sind schwach singular [7]. Wir erhalten durch Transformation auf Kugelkoordinaten und Grenzwertbildung

$$\begin{aligned}
& \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{S_\varepsilon(\mathbf{y})} N(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \operatorname{div} \mathbf{m}(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \\
&= -\frac{1}{4\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{S_\varepsilon(\mathbf{y})} \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \operatorname{div} \mathbf{m}(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \\
&= -\frac{1}{4\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{S_\varepsilon(0)} \frac{1}{|\tilde{\mathbf{x}}|} \operatorname{div} \mathbf{m}(\tilde{\mathbf{x}}, \mathbf{y}) \, d\tilde{\mathbf{x}} \\
&= -\frac{1}{4\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{S_\varepsilon(0)} \frac{1}{r} r^2 \sin \psi \operatorname{div} \mathbf{m}(r, \varphi, \psi, \mathbf{y}) \, dr \, d\varphi \, d\psi \\
&= 0,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\partial S_\varepsilon(\mathbf{y})} N(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \mathbf{m}(\mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\nu}(\mathbf{x}) \, d\sigma(\mathbf{x}) \\
&= -\frac{1}{4\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\partial S_\varepsilon(\mathbf{y})} \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \mathbf{m}(\mathbf{x}) \cdot \boldsymbol{\nu}(\mathbf{x}) \, d\sigma(\mathbf{x}) \\
&= -\frac{1}{4\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\partial S_\varepsilon(0)} \frac{1}{|\tilde{\mathbf{x}}|} \mathbf{m}(\tilde{\mathbf{x}}, \mathbf{y}) \cdot \boldsymbol{\nu}(\tilde{\mathbf{x}}, \mathbf{y}) \, d\sigma(\tilde{\mathbf{x}}) \\
&= -\frac{1}{4\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\partial S_\varepsilon(0)} \frac{1}{\varepsilon} \varepsilon^2 \sin \varphi \mathbf{m}(\varphi, \psi, \mathbf{y}) \cdot \boldsymbol{\nu}(\varphi, \psi, \mathbf{y}) \, d\varphi \, d\psi \\
&= 0.
\end{aligned}$$

□

Wir erhalten somit

$$\begin{aligned}
E_s(\mathbf{m}) &= \frac{\mu_0}{2} \int_{\Omega} \mathbf{m} \cdot \nabla u_1 \, d\mathbf{x} - \frac{\mu_0}{2} \int_{\Omega} \int_{\partial\Omega} N(\mathbf{x} - \mathbf{y}) (\operatorname{div} \mathbf{m}) g(\mathbf{y}) \, d\sigma(\mathbf{y}) \, d\mathbf{x} \\
&\quad + \frac{\mu_0}{2} \int_{\partial\Omega} \int_{\partial\Omega} N(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \boldsymbol{\nu}_x \cdot \mathbf{m}(\mathbf{x}) g(\mathbf{y}) \, d\sigma(\mathbf{y}) \, d\sigma(\mathbf{x}).
\end{aligned} \tag{3.15}$$

Bei der Berechnung von u_1 fällt die Wahl auf einen FEM-Ansatz. Wir wählen lineare Ansatzfunktionen und bestimmen die Koeffizienten in Abhängigkeit von der Magnetisierung. Für u_2 haben wir jedoch die Möglichkeit, zwischen der Finite-Elemente-Methode

und der Randelemente-Methode zu wählen, da die Lösung für u_2 explizit durch ein Randintegral gegeben ist. Da wir bei der Energieminimierung viele Iterationen durchführen müssen und somit die Streufeldenergie in jedem Iterationsschritt neu berechnet werden muss, entscheiden wir uns, anders als in [2], für die BEM. Dieses Verfahren bietet den Vorteil, dass wir einmalig viel Zeit in die Matrixgenerierung investieren, jedoch bei jeder Berechnung der Streufeldenergie nur Matrix-Vektormultiplikationen durchführen müssen. Die Finite-Elemente-Methode erfordert in jedem Iterationsschritt die Lösung eines Gleichungssystems und erweist sich somit auf lange Sicht als rechenintensiver.

3.2 Berechnung von u_1

Zur Berechnung von u_1 stellen wir diese skalare Funktion mit Hilfe von linearen Ansatzfunktionen dar

$$u_1 = \sum_{i \in I_I} \beta_i \varphi_i, \quad (3.16)$$

$$\nabla u_1 = \sum_{i \in I_I} \beta_i \nabla \varphi_i. \quad (3.17)$$

Aus (3.9) ergibt sich die variationelle Formulierung

$$\int_{\Omega} \nabla u_1 \cdot \nabla \varphi_i \, d\mathbf{x} = - \int_{\Omega} \varphi_i \operatorname{div} \mathbf{m} \, d\mathbf{x}, \quad i \in I_I.$$

Somit erhält man mit (1.11), (1.12), (2.3) und (3.16)

$$\sum_{k \in I_I} \beta_k \mathcal{S}_{ki} = - \sum_{l \in I_G} \alpha_l^T \mathcal{B}_{li}, \quad i \in I_I,$$

ein lineares Gleichungssystem, das wir nach $\beta \in \mathbb{R}^3$ auflösen können. Weitere Informationen dazu befinden sich in Abschnitt 1.1.

3.3 Berechnung von u_2

Da bei der Berechnung von u_2 in (3.11) g nur auf der Oberfläche ausgewertet wird, können wir die Indexmengen einschränken auf

$$g = \sum_{i \in I_S} \beta_i \boldsymbol{\nu} \cdot \nabla \varphi_i - \sum_{j \in I_A} \boldsymbol{\nu} \cdot \alpha_j \varphi_j.$$

Somit formen wir (3.15) um zu

$$\begin{aligned}
E_s(\mathbf{m}) &= \frac{\mu_0}{2} \sum_{i \in I_G} \left(\sum_{j \in I_I} \beta_j \boldsymbol{\alpha}_i \cdot \int_{\Omega} \varphi_i \nabla \varphi_j \, d\mathbf{x} - \boldsymbol{\alpha}_i \cdot \int_{\Omega} \int_{\partial\Omega} \nabla \varphi_i N(\mathbf{x} - \mathbf{y}) g(\mathbf{y}) \, d\sigma(\mathbf{y}) \, d\mathbf{x} \right) \\
&\quad + \frac{\mu_0}{2} \sum_{i \in I_A} \boldsymbol{\alpha}_i \cdot \int_{\partial\Omega} \int_{\partial\Omega} \boldsymbol{\nu}_x \varphi_i(\mathbf{x}) N(\mathbf{x} - \mathbf{y}) g(\mathbf{y}) \, d\sigma(\mathbf{y}) \, d\sigma(\mathbf{x}) \\
&= \frac{\mu_0}{2} \sum_{i \in I_G} \left(\sum_{j \in I_I} \beta_j \boldsymbol{\alpha}_i \cdot \int_{\Omega} \varphi_i \nabla \varphi_j \, d\mathbf{x} - \sum_{j \in I_S} \beta_j \boldsymbol{\alpha}_i \cdot \mathbf{a}_{ij} + \sum_{j \in I_A} \boldsymbol{\alpha}_i \cdot (B_{ij} \boldsymbol{\alpha}_j) \right) \\
&\quad + \frac{\mu_0}{2} \sum_{i \in I_A} \left(\sum_{j \in I_S} \beta_j \boldsymbol{\alpha}_i \cdot \mathbf{c}_{ij} - \sum_{j \in I_A} \boldsymbol{\alpha}_i \cdot (D_{ij} \boldsymbol{\alpha}_j) \right),
\end{aligned}$$

wobei

$$\begin{aligned}
\mathbf{a}_{ij} &= \int_{\Omega} \int_{\partial\Omega} \nabla \varphi_i(\mathbf{x}) N(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \boldsymbol{\nu}_y \cdot \nabla \varphi_j(\mathbf{y}) \, d\sigma(\mathbf{y}) \, d\mathbf{x}, \\
B_{ij} &= \int_{\Omega} \int_{\partial\Omega} \nabla \varphi_i(\mathbf{x}) N(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \varphi_j(\mathbf{y}) \boldsymbol{\nu}_y^T \, d\sigma(\mathbf{y}) \, d\mathbf{x}, \\
\mathbf{c}_{ij} &= \int_{\partial\Omega} \int_{\partial\Omega} \boldsymbol{\nu}_x \varphi_i(\mathbf{x}) N(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \boldsymbol{\nu}_y \cdot \nabla \varphi_j(\mathbf{y}) \, d\sigma(\mathbf{y}) \, d\sigma(\mathbf{x}), \\
D_{ij} &= \int_{\partial\Omega} \int_{\partial\Omega} \boldsymbol{\nu}_x \varphi_i(\mathbf{x}) N(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \varphi_j(\mathbf{y}) \boldsymbol{\nu}_y^T \, d\sigma(\mathbf{y}) \, d\sigma(\mathbf{x}).
\end{aligned} \tag{3.18}$$

Mit den Bezeichnungen

$$\begin{aligned}
\mathbf{a}_i &= \sum_{j \in I_S} \beta_j \boldsymbol{\alpha}_i \cdot \mathbf{a}_{ij}, \\
\mathbf{b}_i &= \sum_{j \in I_A} \boldsymbol{\alpha}_i \cdot (B_{ij} \boldsymbol{\alpha}_j), \\
\mathbf{c}_i &= \sum_{j \in I_S} \beta_j \boldsymbol{\alpha}_i \cdot \mathbf{c}_{ij}, \\
\mathbf{d}_i &= \sum_{j \in I_A} \boldsymbol{\alpha}_i \cdot (D_{ij} \boldsymbol{\alpha}_j).
\end{aligned} \tag{3.19}$$

ergibt sich folgende Form der Streufeldenergie

$$E_s(\mathbf{m}) = \frac{\mu_0}{2} \sum_{i \in I_G} \left(\sum_{j \in I_I} \beta_j \boldsymbol{\alpha}_i \cdot \int_{\Omega} \varphi_i \nabla \varphi_j \, d\mathbf{x} - \mathbf{a}_i + \mathbf{b}_i \right) + \frac{\mu_0}{2} \sum_{i \in I_A} (\mathbf{c}_i - \mathbf{d}_i).$$

Die Berechnung der Streufeldenergie ist im Vergleich zu den anderen Teilenergien am aufwändigsten, da \mathbf{a}_{ij} , B_{ij} , \mathbf{c}_{ij} und D_{ij} vollbesetzte Matrizen ergeben, deren Einträge Integrale über schwach singuläre Funktionen sind. Die Duffy-Transformation glättet die

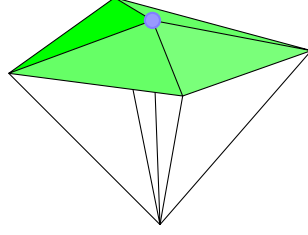


Abbildung 3.1: Knoten $j \in I_A$ und die dazugehörigen Oberflächenseiten, $\Lambda_D(j)$

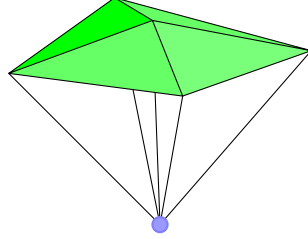


Abbildung 3.2: Knoten $j \in I_S$ und die dazugehörigen Oberflächenseiten, $p(\Lambda_D(j))$

Kernfunktion, um anschließend eine Gauß-Integration durchführen zu können. Näheres zur Duffy-Transformation befindet sich im folgenden Abschnitt. Zum Abspeichern der vollbesetzten Matrizen kommen \mathcal{H} -Matrizen zum Einsatz. Bei der Generierung verwenden wir das ACA-Verfahren. Die \mathcal{H} -Matrizen sichern uns eine schnelle Matrix-Vektor-Multiplikation bei möglichst geringem Speicherbedarf, welches im nächsten Kapitel genauer beschrieben wird.

Sei Λ_D die Menge aller Oberflächendreiecke π und $\Lambda_D(j)$ die Einschränkung auf die Dreiecke, die j als Ecke besitzen, siehe Abbildung 3.1. Dagegen bezeichnet $p(\Lambda_D(j))$ die Oberflächendreiecke der Tetraeder, die j als Ecke besitzen. Mit $\hat{p}(\pi)$ ist der Knoten gemeint, der im Tetraeder gegenüber vom Oberflächendreieck π ist, siehe Abbildung 3.2. Weiterhin bezeichnet $\Lambda_T(j)$ die Menge aller Tetraeder mit j als Ecke. Zur Vertauschung von Summen benötigen wir folgende zwei Identitäten

$$\{(j, \pi) | j \in I_A \wedge \pi \in \Lambda_D(j)\} = \{(j, \pi) | \pi \in \Lambda_D \wedge j \in \pi\}, \quad (3.20)$$

und

$$\{(j, \pi) | j \in I_S \wedge \pi \in p(\Lambda_D(j))\} = \{(j, \pi) | \pi \in \Lambda_D \wedge j \in \hat{p}(\pi)\}. \quad (3.21)$$

Mit diesen beiden Gleichungen können wir eine oberflächen- bzw. tetraederelementweise Berechnung durchführen, im Gegensatz zu einer knotenbasierten Auswertung wie in

den Gleichungen (3.19). Die elementweise Berechnung ist eine naheliegende Herangehensweise, da lineare Ansatzfunktionen jeweils nur auf bestimmten Oberflächen- oder Tetraederelementen ungleich Null sind. Weiterhin werden Sprünge durch die Geometrie in den Einträgen der vollbesetzten Matrizen vermieden, indem wir die Normale und den Gradienten der linearen Ansatzfunktionen aus den Integralen herausziehen. Somit werden die Approximationseigenschaften verbessert und die \mathcal{H} -Matrizen benötigen bei gleicher Genauigkeit weniger Speicherplatz. Weiterhin werden für eine effiziente Implementierung so viele Operationen wie möglich aus den inneren Schleifen herausgezogen. Wir versuchen im Voraus möglichst große Teile der Berechnungen durchzuführen, um so durch Mehrfachverwendung dieser, wie zum Beispiel bei Iterationen, Vorteile zu erhalten. Somit ergibt sich

$$\begin{aligned}
\mathbf{a}_i &= \sum_{j \in I_S} \beta_j \boldsymbol{\alpha}_i \cdot \mathbf{a}_{ij} \\
&= \sum_{j \in I_S} \beta_j \boldsymbol{\alpha}_i \cdot \int_{\Omega} \int_{\partial\Omega} \nabla \varphi_i(\mathbf{x}) N(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \boldsymbol{\nu}_y \cdot \nabla \varphi_j(\mathbf{y}) \, d\sigma(\mathbf{y}) \, d\mathbf{x} \\
&= \sum_{j \in I_S} \sum_{\tau \in \Lambda_T(i)} \sum_{\pi \in \Lambda_D(j)} \beta_j \boldsymbol{\alpha}_i \cdot \int_{\tau} \int_{\pi} \nabla \varphi_i(\mathbf{x}) N(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \boldsymbol{\nu}_y \cdot \nabla \varphi_j(\mathbf{y}) \, d\sigma(\mathbf{y}) \, d\mathbf{x} \\
&= \sum_{\tau \in \Lambda_T(i)} \sum_{\pi \in \Lambda_D} \boldsymbol{\alpha}_i \cdot \nabla \varphi_i|_{\tau} \int_{\tau} \int_{\pi} N(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \, d\sigma(\mathbf{y}) \, d\mathbf{x} \sum_{j \in \pi} \beta_j \boldsymbol{\nu}|_{\pi} \cdot \nabla \varphi_j|_{\pi} \\
&= \sum_{\tau \in \Lambda_T(i)} \alpha_a^i(\tau) \sum_{\pi \in \Lambda_D} f_a(\tau, \pi) \beta_a(\pi),
\end{aligned}$$

mit

$$f_a(\tau, \pi) := \int_{\tau} \int_{\pi} N(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \, d\sigma(\mathbf{y}) \, d\mathbf{x}, \quad (3.22)$$

$$\alpha_a^i(\tau) := \boldsymbol{\alpha}_i \cdot \nabla \varphi_i|_{\tau} \quad (3.23)$$

$$\beta_a(\pi) := \sum_{j \in \pi} \beta_j \boldsymbol{\nu}|_{\pi} \cdot \nabla \varphi_j|_{\pi}, \quad (3.24)$$

Für die zweite Gleichung aus (3.19) erhält man,

$$\begin{aligned}
\mathbf{b}_i &= \sum_{j \in I_A} \boldsymbol{\alpha}_i \cdot (B_{ij} \boldsymbol{\alpha}_j) \\
&= \sum_{j \in I_A} \boldsymbol{\alpha}_i \cdot \left(\int_{\Omega} \int_{\partial\Omega} \nabla \varphi_i(\mathbf{x}) N(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \varphi_j(\mathbf{y}) \boldsymbol{\nu}_y^T d\sigma(\mathbf{y}) d\mathbf{x} \boldsymbol{\alpha}_j \right) \\
&= \sum_{j \in I_A} \sum_{\tau \in \Lambda_T(i)} \sum_{\pi \in \Lambda_D(j)} \boldsymbol{\alpha}_i \cdot \nabla \varphi_i|_{\tau} \int_{\tau} \int_{\pi} N(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \varphi_j(\mathbf{y}) d\sigma(\mathbf{y}) d\mathbf{x} \boldsymbol{\alpha}_j \cdot \boldsymbol{\nu}|_{\pi} \\
&= \sum_{\tau \in \Lambda_T(i)} \sum_{\pi \in \Lambda_D} \sum_{j \in \pi} \alpha_a^i(\tau) \int_{\tau} \int_{\pi} N(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \varphi_j(\mathbf{y}) d\sigma(\mathbf{y}) d\mathbf{x} \alpha_B^j(\pi) \\
&= \sum_{\tau \in \Lambda_T(i)} \alpha_a^i(\tau) \sum_{\pi \in \Lambda_D} \sum_{j \in \pi} f_B^j(\tau, \pi) \alpha_B^j(\pi),
\end{aligned}$$

mit

$$f_B^j(\tau, \pi) := \int_{\tau} \int_{\pi} N(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \varphi_j(\mathbf{y}) d\sigma(\mathbf{y}) d\mathbf{x}, \quad (3.25)$$

$$\alpha_B^j(\pi) := \boldsymbol{\alpha}_j \cdot \boldsymbol{\nu}|_{\pi}. \quad (3.26)$$

Für \mathbf{c}_i folgt

$$\begin{aligned}
\mathbf{c}_i &= \sum_{j \in I_S} \beta_j \boldsymbol{\alpha}_i \cdot \mathbf{c}_{ij} \\
&= \sum_{j \in I_S} \beta_j \boldsymbol{\alpha}_i \cdot \int_{\partial\Omega} \int_{\partial\Omega} \boldsymbol{\nu}_x \varphi_i(\mathbf{x}) N(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \boldsymbol{\nu}_y \cdot \nabla \varphi_j(\mathbf{y}) d\sigma(\mathbf{y}) d\sigma(\mathbf{x}) \\
&= \sum_{j \in I_S} \sum_{\tau \in \Lambda_D(i)} \sum_{\pi \in \Lambda_D(j)} \boldsymbol{\alpha}_i \cdot \boldsymbol{\nu}|_{\tau} \int_{\tau} \int_{\pi} \varphi_i(\mathbf{x}) N(\mathbf{x} - \mathbf{y}) d\sigma(\mathbf{y}) d\sigma(\mathbf{x}) \beta_j \boldsymbol{\nu}|_{\pi} \cdot \nabla \varphi_j|_{\pi} \\
&= \sum_{\tau \in \Lambda_D(i)} \alpha_B^j(\tau) \sum_{\pi \in \Lambda_D} \int_{\tau} \int_{\pi} \varphi_i(\mathbf{x}) N(\mathbf{x} - \mathbf{y}) d\sigma(\mathbf{y}) d\sigma(\mathbf{x}) \sum_{j \in \pi} \beta_j \boldsymbol{\nu}|_{\pi} \cdot \nabla \varphi_j|_{\pi} \\
&= \sum_{\tau \in \Lambda_D(i)} \alpha_B^j(\tau) \sum_{\pi \in \Lambda_D} f_c^i(\tau, \pi) \beta_a(\pi),
\end{aligned}$$

mit

$$f_c^i(\tau, \pi) := \int_{\tau} \int_{\pi} \varphi_i(\mathbf{x}) N(\mathbf{x} - \mathbf{y}) d\sigma(\mathbf{y}) d\sigma(\mathbf{x}). \quad (3.27)$$

Bei der letzten Gleichung aus (3.19) ergibt sich

$$\begin{aligned}
\mathfrak{d}_i &= \sum_{j \in I_A} \boldsymbol{\alpha}_i \cdot (D_{ij} \boldsymbol{\alpha}_j) \\
&= \sum_{j \in I_A} \boldsymbol{\alpha}_i \cdot \left(\int_{\partial\Omega} \int_{\partial\Omega} \boldsymbol{\nu}_x \varphi_i(\mathbf{x}) N(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \varphi_j(\mathbf{y}) \boldsymbol{\nu}_y^T d\sigma(\mathbf{y}) d\sigma(\mathbf{x}) \boldsymbol{\alpha}_j \right) \\
&= \sum_{j \in I_A} \sum_{\tau \in \Lambda_D(i)} \sum_{\pi \in \Lambda_D(j)} \boldsymbol{\alpha}_i \cdot \boldsymbol{\nu}|_\tau \int_\tau \int_\pi \varphi_i(\mathbf{x}) N(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \varphi_j(\mathbf{y}) d\sigma(\mathbf{y}) d\sigma(\mathbf{x}) \boldsymbol{\alpha}_j \cdot \boldsymbol{\nu}|_\pi \\
&= \sum_{\tau \in \Lambda_D(i)} \alpha_B^i(\tau) \sum_{\pi \in \Lambda_D} \sum_{j \in \pi} \int_\tau \int_\pi \varphi_i(\mathbf{x}) N(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \varphi_j(\mathbf{y}) d\sigma(\mathbf{y}) d\sigma(\mathbf{x}) \alpha_B^j(\pi) \\
&= \sum_{\tau \in \Lambda_D(i)} \alpha_B^i(\tau) \sum_{\pi \in \Lambda_D} \sum_{j \in \pi} f_D^{ij}(\tau, \pi) \alpha_B^j(\pi),
\end{aligned}$$

mit

$$f_D^{ij}(\tau, \pi) := \int_\tau \int_\pi \varphi_i(\mathbf{x}) N(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \varphi_j(\mathbf{y}) d\sigma(\mathbf{y}) d\sigma(\mathbf{x}). \quad (3.28)$$

3.4 Duffy-Transformation

Mehrdimensionale Integrale über singuläre Funktionen stellen eine Herausforderung bei der numerischen Berechnung dar. Ist die Singularität in nur einem Punkt, so kann man durch die Transformation auf Kugelkoordinaten den Integranden glätten. Dies hat jedoch den Nachteil, dass bei einem nicht kugelartigen Gebiet die Integrationsgrenzen bei der Auswertung ungünstig sein können. Einen anderen Ansatz bietet die Duffy-Transformation [12]. Diese überführt durch eine einfache Variablentransformation ein Dreieck in ein Quadrat und kann so die Singularitäten glätten.

Zur Verdeutlichung dient das folgende, einfache Beispiel. Betrachte

$$I_B := \int_0^1 \int_0^x \frac{1}{x+y} dy dx,$$

mit einer Singularität im Punkt $x = y = 0$. Durch die Transformation, $x = \xi$ und $y = \xi\eta$, erhält man

$$I_B = \int_0^1 \int_0^1 \frac{1}{1+\eta} d\eta d\xi.$$

Das Dreieck wurde auf ein Quadrat transformiert, und das Ergebnis kann mittels Gauß-Integration berechnet werden, weil der Kern nun glatt ist.

Bei der Berechnung der Integrale in (3.22), (3.25), (3.27) und (3.28) müssen wir über das Newton-Potential integrieren. Dabei wenden wir die Duffy-Transformation an, um die Singularitäten zu glätten. In [10] wird die Integration über zwei Dreiecke für die drei Fälle: identische Dreiecke, gemeinsame Kante und gemeinsamer Punkt ausführlich diskutiert. Mit den dort angegebenen Transformationen können wir (3.27) und (3.28) berechnen. Für (3.22) und (3.25) müssen wir die Integrationsgebiete auf den Fall Dreieck mit Tetraeder erweitern. Wir starten in unserem Fall mit den Referenzelementen (1.7) und (1.8). Somit erhalten wir für eine Kernfunktion $f : \mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$

$$I := \int_0^1 \int_0^{1-x_1} \int_0^{1-x_1-x_2} \int_0^1 \int_0^{1-y_1} f(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\mathbf{y} d\mathbf{x}. \quad (3.29)$$

Zuerst transformieren wir auf neue Referenzelemente mit $\tilde{x}_1 = 1 - x_1$, $\tilde{x}_2 = x_2$, $\tilde{x}_3 = x_3$ und $\tilde{y}_1 = 1 - y_1$, $\tilde{y}_2 = y_2$

$$I = \int_0^1 \int_0^{\tilde{x}_1} \int_0^{\tilde{x}_1-\tilde{x}_2} \int_0^1 \int_0^{\tilde{y}_1} f\left(\begin{pmatrix} 1-\tilde{x}_1 \\ \tilde{x}_2 \\ \tilde{x}_3 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1-\tilde{y}_1 \\ \tilde{y}_2 \end{pmatrix}\right) d\tilde{\mathbf{y}} d\tilde{\mathbf{x}}.$$

Nun führen wir Reaktivkoordinaten ein, $z_1 = \tilde{y}_1 - \tilde{x}_1$ und $z_2 = \tilde{y}_2 - \tilde{x}_2$. Für das Newton-Potential ergibt sich dadurch eine Singularität im Punkt $\mathbf{z} = 0$, $\tilde{x}_3 = 0$. Wir erhalten

$$I = \int_0^1 \int_0^{\tilde{x}_1} \int_0^{\tilde{x}_1-\tilde{x}_2} \int_{-\tilde{x}_1}^{1-\tilde{x}_1} \int_{-\tilde{x}_2}^{z_1+\tilde{x}_1-\tilde{x}_2} f\left(\begin{pmatrix} 1-\tilde{x}_1 \\ \tilde{x}_2 \\ \tilde{x}_3 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1-z_1-\tilde{x}_1 \\ z_2+\tilde{x}_2 \end{pmatrix}\right) d\mathbf{z} d\tilde{\mathbf{x}}. \quad (3.30)$$

Das Integrationsgebiet spalten wir analog zu [10] in sechs Gebiete auf und erhalten durch Vertauschung der Integrationsreihenfolge

$$\begin{aligned} & \left\{ \begin{array}{l} -1 \leq z_1 \leq 0 \\ -1 \leq z_2 \leq z_1 \\ -z_2 \leq \tilde{x}_1 \leq 1 \\ -z_2 \leq \tilde{x}_2 \leq \tilde{x}_1 \\ 0 \leq \tilde{x}_3 \leq \tilde{x}_1 - \tilde{x}_2 \end{array} \right\} \cup \left\{ \begin{array}{l} -1 \leq z_1 \leq 0 \\ z_1 \leq z_2 \leq 0 \\ -z_1 \leq \tilde{x}_1 \leq 1 \\ -z_2 \leq \tilde{x}_2 \leq \tilde{x}_1 + z_1 - z_2 \\ 0 \leq \tilde{x}_3 \leq \tilde{x}_1 - \tilde{x}_2 \end{array} \right\} \cup \left\{ \begin{array}{l} -1 \leq z_1 \leq 0 \\ 0 \leq z_2 \leq 1 + z_1 \\ z_2 - z_1 \leq \tilde{x}_1 \leq 1 \\ 0 \leq \tilde{x}_2 \leq \tilde{x}_1 + z_1 - z_2 \\ 0 \leq \tilde{x}_3 \leq \tilde{x}_1 - \tilde{x}_2 \end{array} \right\} \\ & \cup \left\{ \begin{array}{l} 0 \leq z_1 \leq 1 \\ -1 + z_1 \leq z_2 \leq 0 \\ -z_2 \leq \tilde{x}_1 \leq 1 - z_1 \\ -z_2 \leq \tilde{x}_2 \leq \tilde{x}_1 \\ 0 \leq \tilde{x}_3 \leq \tilde{x}_1 - \tilde{x}_2 \end{array} \right\} \cup \left\{ \begin{array}{l} 0 \leq z_1 \leq 1 \\ 0 \leq z_2 \leq z_1 \\ 0 \leq \tilde{x}_1 \leq 1 - z_1 \\ 0 \leq \tilde{x}_2 \leq \tilde{x}_1 \\ 0 \leq \tilde{x}_3 \leq \tilde{x}_1 - \tilde{x}_2 \end{array} \right\} \cup \left\{ \begin{array}{l} 0 \leq z_1 \leq 1 \\ z_1 \leq z_2 \leq 1 \\ z_2 - z_1 \leq \tilde{x}_1 \leq 1 - z_1 \\ 0 \leq \tilde{x}_2 \leq z_1 - z_2 + \tilde{x}_1 \\ 0 \leq \tilde{x}_3 \leq \tilde{x}_1 - \tilde{x}_2 \end{array} \right\}. \end{aligned}$$

Es entstehen die Teilgebiete D_i , $1 \leq i \leq 6$. Die \mathbf{z} -Variable beschreibt die äußere Integration. Nun transformieren wir die einzelnen Gebiete, so dass danach eine Transformation auf den Einheitswürfel möglich ist.

- D_1 :

$$\tilde{x}_1 = w_1, \tilde{x}_2 = w_1 - w_2 + w_3, \tilde{x}_3 = w_5, z_1 = -w_4, z_2 = -w_3,$$

$$I_1 = \int_0^1 \int_0^{w_1} \int_0^{w_2} \int_0^{w_3} \int_0^{w_2-w_3} f \left(\begin{pmatrix} 1-w_1 \\ w_1-w_2+w_3 \\ w_5 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1-w_1+w_4 \\ w_1-w_2 \end{pmatrix} \right) d\mathbf{w},$$

- D_2 :

$$\tilde{x}_1 = w_1, \tilde{x}_2 = w_2 - w_3 + w_4, \tilde{x}_3 = w_5, z_1 = -w_3, z_2 = -w_4,$$

$$I_2 = \int_0^1 \int_0^{w_1} \int_0^{w_2} \int_0^{w_3} \int_0^{w_1-w_2+w_3-w_4} f \left(\begin{pmatrix} 1-w_1 \\ w_2-w_3+w_4 \\ w_5 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1-w_1+w_3 \\ w_2-w_3 \end{pmatrix} \right) d\mathbf{w},$$

- D_3 :

$$\tilde{x}_1 = w_1, \tilde{x}_2 = w_2 - w_3, \tilde{x}_3 = w_5, z_1 = -w_4, z_2 = w_3 - w_4,$$

$$I_3 = \int_0^1 \int_0^{w_1} \int_0^{w_2} \int_0^{w_3} \int_0^{w_1-w_2+w_3} f \left(\begin{pmatrix} 1-w_1 \\ w_2-w_3 \\ w_5 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1-w_1+w_4 \\ w_2-w_4 \end{pmatrix} \right) d\mathbf{w},$$

- D_4 :

$$\tilde{x}_1 = w_1 - w_4, \tilde{x}_2 = w_2 - w_4, \tilde{x}_3 = w_5, z_1 = w_4, z_2 = -w_3 + w_4,$$

$$I_4 = \int_0^1 \int_0^{w_1} \int_0^{w_2} \int_0^{w_3} \int_0^{w_1-w_2} f \left(\begin{pmatrix} 1-w_1+w_4 \\ w_2-w_4 \\ w_5 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1-w_1 \\ w_2-w_3 \end{pmatrix} \right) d\mathbf{w},$$

- D_5 :

$$\tilde{x}_1 = w_1 - w_3, \tilde{x}_2 = w_2 - w_3, \tilde{x}_3 = w_5, z_1 = w_3, z_2 = w_4,$$

$$I_5 = \int_0^1 \int_0^{w_1} \int_0^{w_2} \int_0^{w_3} \int_0^{w_1-w_2} f \left(\begin{pmatrix} 1-w_1+w_3 \\ w_2-w_3 \\ w_5 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1-w_1 \\ w_2-w_3+w_4 \end{pmatrix} \right) d\mathbf{w},$$

- D_6 :

$$\tilde{x}_1 = w_1 - w_4, \tilde{x}_2 = w_1 - w_2, \tilde{x}_3 = w_5, z_1 = w_4, z_2 = w_3,$$

$$I_6 = \int_0^1 \int_0^{w_1} \int_0^{w_2} \int_0^{w_3} \int_0^{w_2-w_4} f \left(\begin{pmatrix} 1-w_1+w_4 \\ w_1-w_2 \\ w_5 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1-w_1 \\ w_1-w_2+w_3 \end{pmatrix} \right) d\mathbf{w}.$$

Im letzten Schritt transformieren wir die Integrationsgebiete auf den Einheitswürfel $(0,1)^5$. Wir setzen $w_1 = \xi$, $w_2 = \xi\eta_1$, $w_3 = \xi\eta_1\eta_2$ und $w_4 = \xi\eta_1\eta_2\eta_3$. Zur übersichtlicheren Darstellung sei $\boldsymbol{\eta} = (\eta_1, \eta_2, \eta_3, \eta_4)$. Somit erhalten wir für das gesamte Problem folgende Duffy-Transformation

- D_1 :

$$w_5 = \xi\eta_1\eta_4(1 - \eta_2), \quad |\det_1| = \xi^4\eta_1^3\eta_2(1 - \eta_2),$$

$$I_1 = \int_0^1 \int_{(0,1)^4} |\det_1| f \left(\begin{pmatrix} 1 - \xi \\ \xi(1 - \eta_1 + \eta_1\eta_2) \\ \xi\eta_1\eta_4(1 - \eta_2) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 - \xi + \xi\eta_1\eta_2\eta_3 \\ \xi(1 - \eta_1) \end{pmatrix} \right) d\boldsymbol{\eta} d\xi,$$

- D_2 :

$$w_5 = \xi\eta_4(1 - \eta_1 + \eta_1\eta_2 - \eta_1\eta_2\eta_3), \quad |\det_2| = \xi^4\eta_1^2\eta_2(1 - \eta_1 + \eta_1\eta_2 - \eta_1\eta_2\eta_3),$$

$$I_2 = \int_0^1 \int_{(0,1)^4} |\det_2| f \left(\begin{pmatrix} 1 - \xi \\ \xi\eta_1(1 - \eta_2 + \eta_2\eta_3) \\ \xi\eta_4(1 - \eta_1 + \eta_1\eta_2 - \eta_1\eta_2\eta_3) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 - \xi + \xi\eta_1\eta_2 \\ \xi\eta_1(1 - \eta_2) \end{pmatrix} \right) d\boldsymbol{\eta} d\xi,$$

- D_3 :

$$w_5 = \xi\eta_4(1 - \eta_1 + \eta_1\eta_2), \quad |\det_3| = \xi^4\eta_1^2\eta_2(1 - \eta_1 + \eta_1\eta_2),$$

$$I_3 = \int_0^1 \int_{(0,1)^4} |\det_3| f \left(\begin{pmatrix} 1 - \xi \\ \xi\eta_1(1 - \eta_2) \\ \xi\eta_4(1 - \eta_1 + \eta_1\eta_2) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 - \xi + \xi\eta_1\eta_2\eta_3 \\ \xi\eta_1(1 - \eta_2\eta_3) \end{pmatrix} \right) d\boldsymbol{\eta} d\xi,$$

- D_4 :

$$w_5 = \xi\eta_4(1 - \eta_1), \quad |\det_4| = \xi^4\eta_1^2\eta_2(1 - \eta_1),$$

$$I_4 = \int_0^1 \int_{(0,1)^4} |\det_4| f \left(\begin{pmatrix} 1 - \xi + \xi\eta_1\eta_2\eta_3 \\ \xi\eta_1(1 - \eta_2\eta_3) \\ \xi\eta_4(1 - \eta_1) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 - \xi \\ \xi\eta_1(1 - \eta_2) \end{pmatrix} \right) d\boldsymbol{\eta} d\xi,$$

- D_5 :

$$w_5 = \xi\eta_4(1 - \eta_1), \quad |\det_5| = \xi^4\eta_1^2\eta_2(1 - \eta_1),$$

$$I_5 = \int_0^1 \int_{(0,1)^4} |\det_5| f \left(\begin{pmatrix} 1 - \xi + \xi\eta_1\eta_2 \\ \xi\eta_1(1 - \eta_2) \\ \xi\eta_4(1 - \eta_1) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 - \xi \\ \xi\eta_1(1 - \eta_2 + \eta_2\eta_3) \end{pmatrix} \right) d\boldsymbol{\eta} d\xi,$$

- D_6 :

$$w_5 = \xi\eta_1\eta_4(1 - \eta_2\eta_3), \quad |\det_6| = \xi^4\eta_1^3\eta_2(1 - \eta_2\eta_3),$$

$$I_6 = \int_0^1 \int_{(0,1)^4} |\det_6| f \left(\begin{pmatrix} 1 - \xi + \xi\eta_1\eta_2\eta_3 \\ \xi(1 - \eta_1) \\ \xi\eta_1\eta_4(1 - \eta_2\eta_3) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 - \xi \\ \xi(1 - \eta_1 + \eta_1\eta_2) \end{pmatrix} \right) d\boldsymbol{\eta} d\xi,$$

mit $I = I_1 + I_2 + I_3 + I_4 + I_5 + I_6$. Somit wurde der Kern geglättet und wir sind in der Lage, (3.22) und (3.25) mit Gauß-Integration zu bestimmen wobei der Fehler gering bleibt. Dabei wird die Duffy-Transformation nur angewendet, wenn die zu integrierenden Gebiete nah beieinander liegen und dadurch dicht an der Singularität sind. Durch folgende Beispiele erkennt man die Effektivität der obigen Transformation. Zum einen wurden die Integrale durch Gauß-Quadratur und zum anderen durch Gauß-Quadratur mit vorheriger Duffy-Transformation berechnet. Zur Bestimmung der Referenzlösung der Integrale wurde eine adaptive Simpson-Quadratur, siehe [13], implementiert. Die Werte in den runden Klammern geben die relative Abweichung zur Referenzlösung an.

$$\int_0^1 \int_0^{1-y_1} \int_0^1 \int_0^{1-x_1} \int_0^{1-x_1-x_2} \frac{1}{\left| \begin{pmatrix} x_1 - y_1 \\ x_2 - y_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \right|} d\mathbf{x} d\mathbf{y} = 0.2150, \quad (3.31)$$

Gauß-Quad	Duffy+Gauß-Quad
0.2074 (-3.5e-02)	0.2152 (9.3e-04)

$$\int_0^1 \int_0^{1-y_1} \int_0^1 \int_0^{1-x_1} \int_0^{1-x_1-x_2} \frac{1-y_1-y_2}{\left| \begin{pmatrix} x_1 - y_1 \\ x_2 - y_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \right|} d\mathbf{x} d\mathbf{y} = 0.0764368, \quad (3.32)$$

Gauß-Quad	Duffy+Gauß-Quad
0.07626 (-2.3e-03)	0.07649 (6.9e-04)

$$\int_0^1 \int_0^{1-y_1} \int_0^1 \int_0^{1-x_1} \frac{1-y_1-y_2}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} d\mathbf{x} d\mathbf{y} = 0.341632, \quad (3.33)$$

Gauß-Quad	Duffy+Gauß-Quad
n.a.	0.34164 (2.3e-05)

$$\int_0^1 \int_0^{1-y_1} \int_0^1 \int_0^{1-x_1} \frac{(1-y_1-y_2)(1-x_1-x_2)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} d\mathbf{x} d\mathbf{y} = 0.136653, \quad (3.34)$$

Gauß-Quad	Duffy+Gauß-Quad
n.a.	0.136657 (2.9e-05)

Es ist zu erkennen, dass die Duffy-Transformation die Integrale (3.31) und (3.32) glättet und somit eine genauere Berechnung ermöglicht. Für (3.33) und (3.34) ist es nur mit Hilfe der Transformation möglich, die Integrale zu berechnen, da sonst bei der verwendeten Implementierung der Gauß-Quadratur in der Singularität ausgewertet wird.

Kapitel 4

Hierarchische Matrizen

Bei allen Teilenergien entstehen aus einem Finite-Elemente-Ansatz schwachbesetzte Gleichungssysteme die effizient gelöst werden müssen. Weiterhin treten bei der Berechnung der Streufeldenergie vollbesetzte Matrizen auf, die aus den Einträgen (3.22), (3.25), (3.27) und (3.28) resultieren. Diese müssen effizient erzeugt und abgespeichert werden. Wir benötigen eine schnelle Matrix-Vektor-Multiplikation um (3.19) zu berechnen oder bei der später auftretenden Energieminimierung. Effizienz bedeutet in unserem Zusammenhang lineare oder quasi-lineare Komplexität im Gegensatz zu quadratischer oder kubischer Komplexität bei einträgsweiser Berechnung. Eine Möglichkeit, die genannten Forderungen zu erfüllen, ist der Einsatz von hierarchischen Matrizen, kurz \mathcal{H} -Matrizen, und die Anwendung der hierarchischen LU -Zerlegung und des ACA-Verfahrens.

4.1 Aufbau

\mathcal{H} -Matrizen basieren auf zwei Prinzipien, zum einen auf der Approximation von Matrizen mit niedrigem Rang und zum anderen auf der Unterteilung von Matrizen in geeignete Blöcke.

Definition 4.1.1. Die Matrix $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$ gehört zur Menge $\mathbb{C}_k^{m \times n}$ genau dann, wenn zwei Matrizen $U \in \mathbb{C}^{m \times k}$ und $V \in \mathbb{C}^{n \times k}$ existieren, so dass

$$A = UV^H. \quad (4.1)$$

Definition 4.1.2. Man spricht von einer Niedrigrangmatrix $A \in \mathbb{C}_k^{m \times n}$, wenn

$$k(m+n) < m \cdot n.$$

Im Folgenden wird eine Matrix $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$ immer durch die äußere Produktform, wie in (4.1), dargestellt, wenn sie eine Niedrigrangmatrix ist. Ansonsten wird eine elementweise Darstellung von A bevorzugt.

Um eine Matrix in geeignete Blöcke zu unterteilen, benötigen wir die Mengen I und J der Zeilen- und Spaltenindizes, $I := \{1, \dots, m\}$ und $J := \{1, \dots, n\}$.

Definition 4.1.3. Es seien $I, J \subset \mathbb{N}$. Eine Menge P wird Partition genannt, wenn

$$I \times J = \bigcup_{b \in P} b$$

und wenn aus $b_1 \cap b_2 \neq \emptyset$ immer $b_1 = b_2$ für alle $b_1, b_2 \in P$ folgt.

Für eine gegebene Matrix $A \in \mathbb{C}^{I \times J}$ und eine gegebene Partition P bezeichnet A_b die Einschränkung von A auf den Block $b \in P$. Die Menge aller Teilmengen von $I \times J$ wird mit $\mathcal{P}(I \times J)$ bezeichnet und aus obiger Definition 4.1.3 folgt $P \subset \mathcal{P}(I \times J)$.

Um eine geeignete Partitionierung zu erhalten, benötigen wir eine Zulässigkeitsbedingung. Diese muss fordern,

- (i) wenn b zulässig ist, so fallen die Singulärwerte von A_b exponentiell;
- (ii) dass die Zulässigkeitsbedingung auf jeden Block $t \times s \in \mathcal{P}(I \times J)$ angewendet werden kann und die benötigten Operationen $\mathcal{O}(|t| + |s|)$ sind;
- (iii) wenn b zulässig ist, ist jede Teilmenge $b' \subset b$ ebenfalls zulässig.

Sei der Block $b \in P$ zulässig, so wird A_b in der äußeren Produktform (4.1) abgespeichert. Um zu verhindern, dass die Partitionierung zu fein gewählt wird und der Gesamtaufwand sich unnötig aufbläht, haben wir folgende Definition.

Definition 4.1.4. Eine Partition ist zulässig, wenn jeder Block $t \times s \in P$ entweder zulässig oder klein ist. Klein bedeutet dabei, dass $\min\{|t|, |s|\} \leq n_{\min}$, für ein je nach Problem gewähltes $n_{\min} \in \mathbb{N}$ ist.

Nun benötigen wir für unsere Unterteilungen noch eine gewisse Struktur.

Definition 4.1.5. Es sei $I \subset \mathbb{N}$. Ein Clusterbaum $T_I = (V, E)$ mit Knoten V und Kanten E ist ein Baum der folgende Bedingungen erfüllt

- (i) I ist Wurzel von T_I ;
- (ii) $\emptyset \neq t = \bigcup_{t' \in S(t)} t', \quad \forall t \in V \setminus \mathcal{L}(T_I)$;
- (iii) für jeden Knoten $t \in V \setminus \mathcal{L}(T_I)$ ist der Grad $\deg t := |S(t)| \geq 2$ von unten begrenzt.

Dabei bezeichnet $S(t) := \{t' \in V : (t, t') \in E\}$ die Söhne von $t \in V$ und $\mathcal{L}(T_I) := \{t \in V : S(t) = \emptyset\}$ die Blätter von T_I .

Es sei angemerkt, dass die Menge der Söhne $S(t)$ für alle $t \in V$ paarweise disjunkt ist. Sind $I, J \subset \mathbb{N}$, so werden im Folgenden Clusterbäume $T_{I \times J}$ aufgrund ihrer Struktur als Blockclusterbäume bezeichnet.

Definition 4.1.6. Seien ein Blockclusterbaum $T_{I \times J}$, eine zulässige Partitionierung $P := \mathcal{L}(T_{I \times J})$ und ein blockweiser Rang $k \in \mathbb{N}$ gegeben, so ist die Menge der hierarchischen Matrizen

$$\mathcal{H}(T_{I \times J}, k) := \{A \in \mathbb{C}^{I \times J} : \text{rank } A_b \leq k \text{ für alle zulässigen } b \in P\}. \quad (4.2)$$

Für unsere weiteren Betrachtungen ist wichtig, dass eine hierarchische Matrix $M \in \mathcal{H}(T_{I \times I}, k)$ einen Speicherbedarf von $\mathcal{O}(kn \log n)$ hat. Die Multiplikation einer \mathcal{H} -Matrix mit einem Vektor benötigt $\mathcal{O}(kn \log n)$ Operationen [6].

4.2 Hierarchische LU -Zerlegung

Zur Lösung von linearen Gleichungssystemen, wie sie bei Finite-Elemente-Systemen entstehen, benötigen wir ein Verfahren mit quasi-linearer Komplexität. Dabei bietet sich die hierarchische LU -Zerlegung an. Wir nutzen die Blockstruktur der \mathcal{H} -Matrizen aus und entwerfen ein rekursives Verfahren, wie in [6] vorgestellt.

Sei ein hierarchischer Block A_{tt} , $t \in T_I \setminus \mathcal{L}(T_I)$ gegeben, so zerlegen wir ihn folgendermaßen,

$$A_{tt} = \begin{bmatrix} A_{t_1 t_1} & A_{t_1 t_2} \\ A_{t_2 t_1} & A_{t_2 t_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_{t_1 t_1} & \\ & L_{t_2 t_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{t_1 t_1} & U_{t_1 t_2} \\ & U_{t_2 t_2} \end{bmatrix},$$

wobei $t_1, t_2 \in T_I$ die Söhne von t in T_I sind. Die LU -Zerlegung des Blockes A_{tt} wurde auf folgende vier Probleme reduziert:

- (i) Berechne $L_{t_1 t_1}$ und $U_{t_1 t_1}$ aus der LU -Zerlegung von $L_{t_1 t_1} U_{t_1 t_1} = A_{t_1 t_1}$;
- (ii) Berechne $U_{t_1 t_2}$ aus $L_{t_1 t_1} U_{t_1 t_2} = A_{t_1 t_2}$;
- (iii) Berechne $L_{t_2 t_1}$ aus $L_{t_2 t_1} U_{t_1 t_1} = A_{t_2 t_1}$;
- (iv) Berechne $L_{t_2 t_2}$ und $U_{t_2 t_2}$ aus der LU -Zerlegung von $L_{t_2 t_2} U_{t_2 t_2} = A_{t_2 t_2} - L_{t_2 t_1} U_{t_1 t_2}$.

Falls ein Block $t \times t \in \mathcal{L}(T_{I \times I})$ ein Blatt ist, so wenden wir die übliche LU -Zerlegung mit Pivotisierung an. Für die Fälle (i) und (iv) sind zwei hierarchische LU -Zerlegungen der halben Größe zu berechnen. Um (ii) zu bestimmen, müssen wir ein Problem der Form

$L_{tt}B_{ts} = A_{ts}$ nach B_{ts} auflösen, wobei $t \times s \in T_{I \times I}$. Wir erhalten eine Block-Vorwärtssubstitution. Falls der Block $t \times s \in \mathcal{L}(T_{I \times I})$ ein Blatt ist, so lösen wir mit Vorwärtssubstitution. Ansonsten führen wir eine Zerlegung in folgende Unterblöcke durch

$$\begin{bmatrix} L_{t_1 t_1} & \\ L_{t_2 t_1} & L_{t_2 t_2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B_{t_1 s_1} & B_{t_1 s_2} \\ B_{t_2 s_1} & B_{t_2 s_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{t_1 s_1} & A_{t_1 s_2} \\ A_{t_2 s_1} & A_{t_2 s_2} \end{bmatrix}$$

und erhalten die folgenden vier Unterprobleme

$$\begin{aligned} L_{t_1 t_1} B_{t_1 s_1} &= A_{t_1 s_1}, \\ L_{t_1 t_1} B_{t_1 s_2} &= A_{t_1 s_2}, \\ L_{t_2 t_2} B_{t_2 s_1} &= A_{t_2 s_1} - L_{t_2 t_1} B_{t_1 s_1}, \\ L_{t_2 t_2} B_{t_2 s_2} &= A_{t_2 s_2} - L_{t_2 t_1} B_{t_1 s_2}. \end{aligned}$$

Diese sind wieder vom Typ (ii). Analog dazu können wir (iii) durch eine rekursive Block-Rückwärtssubstitution lösen.

Die Komplexität der obigen Rekursionen ist dominiert durch die Matrix-Matrix-Multiplikation. Diese benötigt für zwei Matrizen aus $\mathcal{H}(T_{I \times I}, k)$ $\mathcal{O}(k^2 n \log^2 n)$ Operationen [6].

4.3 ACA-Verfahren

Wir benötigen ein Verfahren, um eine Niedrigrangapproximation der aus (3.22), (3.25), (3.27) und (3.28) resultierenden Matrizen zu erstellen. Eine Möglichkeit stellt die Singulärwertzerlegung dar. Man kann den niedrigsten Rang für eine bestimmte Genauigkeit bestimmen. Jedoch entfällt dieses Verfahren wegen der zu hohen Kosten für die Berechnung. Eine andere Möglichkeit ist das Adaptive Cross Approximation (ACA)-Verfahren. Dieses eignet sich vor allem für asymptotisch glatte Kernfunktionen, siehe [6].

Definition 4.3.1. Eine Kernfunktion

$$\kappa : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, \quad (\mathbf{x}, \mathbf{y}) \mapsto \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}).$$

ist asymptotisch glatt, wenn Konstanten c_1 und c_2 existieren, so dass für alle Multiindizes $\alpha, \beta \in \mathbb{N}_0^d$

$$|\partial_{\mathbf{x}}^{\alpha} \partial_{\mathbf{y}}^{\beta} \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y})| \leq c_1 (\alpha + \beta)! (c_2 |\mathbf{x} - \mathbf{y}|)^{-|\alpha| - |\beta| - s}, \quad |\alpha| + |\beta| \geq 1,$$

mit $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$, wobei $\mathbf{x} \neq \mathbf{y}$ gilt. $s \in \mathbb{R}$ bezeichnet die Ordnung der Singularität.

Für unsere Betrachtungen ist das Newtonpotential als Kernfunktion ausschlaggebend.

Lemma 4.3.2. *Das Newtonpotential $N(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = -\frac{1}{4\pi} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2^{-1}$ mit $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^3$ und $\mathbf{x} \neq \mathbf{y}$ ist asymptotisch glatt, wobei $c_1 = \frac{1}{4\pi}$ und $c_2 = \frac{1}{4}$, siehe [14].*

Im Folgenden gehen wir bei der Erstellung einer Niedrigrangapproximation davon aus, dass bereits eine zulässige Partitionierung P der Matrix vorliegt. Somit können wir uns auf zulässige Blöcke $b \in P$ beschränken. Wir betrachten einen einzelnen Block $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Das ACA-Verfahren aus [6] hat die Form

```

Vorgabe  $k = 1$  und  $Z = \emptyset$ 
repeat
  wähle  $i_k$  wie in [6] beschrieben
   $\tilde{v}_k := A_{i_k, 1:n}$ 
  for  $l = 1, \dots, k-1$  do  $\tilde{v}_k := \tilde{v}_k - (u_l)_{i_k} v_l$ 
   $Z := Z \cup \{i_k\}$ 
  if  $\tilde{v}_k$  nicht verschwindet then
     $j_k := \max_{j=1, \dots, n} |(\tilde{v}_k)_j|$ 
     $v_k := (\tilde{v}_k)_{j_k}^{-1} \tilde{v}_k$ 
     $u_k := A_{1:m, j_k}$ 
    for  $l = 1, \dots, k-1$  do  $u_k := u_k - (v_l)_{j_k} u_l$ 
     $k := k+1$ 
  endif
until Abbruchbedingung (4.3) erreicht oder  $Z = \{1, \dots, m\}$ 

```

Algorithmus 4.1: ACA-Verfahren.

Es bezeichnen $A_{i_k, 1:n}$ und $A_{1:m, j_k}$ die i_k -te Zeile und die j_k -te Spalte der Matrix A . Wir definieren die Matrix $S_k := \sum_{l=1}^k u_l v_l^T$ und erhalten $A = S_k + R_k$. Mit wachsendem k wird A immer besser durch S_k approximiert [6]. Für ein vorgegebenes $\varepsilon > 0$ haben wir eine Bedingung, die als Abbruchkriterium genutzt werden kann

$$\|u_{k+1}\|_2 \|v_{k+1}\|_2 \leq \frac{\varepsilon(1-\eta)}{1+\varepsilon} \|S_k\|_F. \quad (4.3)$$

Die Konstante $0 < \eta < 1$ resultiert aus der Zulässigkeitsbedingung, siehe [6]. Der Vorteil des ACA-Verfahrens liegt darin, dass wir je nach Genauigkeit nur bestimmte Einträge aus der Matrix A berechnen brauchen und nicht etwa die gesamte Matrix. So ist es möglich, vorhandene Implementierungen, die bereits die Matrix A bestimmen, durch das ACA-Verfahren zu beschleunigen.

Die Gesamtkomplexität zur Erzeugung einer \mathcal{H} -Matrix $A_{\mathcal{H}} \in \mathcal{H}(T_{I \times J}, k)$ mittels ACA-Verfahren beträgt $\mathcal{O}(n \log n |\log \varepsilon|^{2d})$ [6], wobei d die Dimension des Gebietes Ω darstellt. Somit erhalten wir für unsere Berechnungen $\mathcal{O}(n \log n |\log \varepsilon|^6)$.

Kapitel 5

Energieminimierung

Bei der Energieminimierung besteht das Problem, dass an die Magnetisierung \mathbf{m} immer die punktweise Nebenbedingung $|\mathbf{m}(\mathbf{x})| = 1$ gekoppelt ist. Dadurch können nur bestimmte Verfahren in Betracht gezogen werden. Eine Gruppe von Verfahren erreicht die Nebenbedingung durch Projektion auf die Einheitskugel, wie das Verfahren von Alouges [3] oder die Truncated Newton Method [2]. Eine andere Gruppe verwendet Kugelkoordinaten, so zum Beispiel das nichtlineare Verfahren der konjugierten Gradienten in [2].

5.1 Verfahren von Alouges

Das Verfahren von Alouges ist ein iteratives Verfahren, bei dem wir eine Folge von Magnetisierungen $(\mathbf{m}^{(n)})$, mit der Nebenbedingung $|\mathbf{m}^{(n)}(\mathbf{x})| = 1$, $x \in \Omega$, aufstellen. Dabei ist gegeben, dass

$$E[\mathbf{m}^{(n+1)}] \leq E[\mathbf{m}^{(n)}].$$

Ein großer Vorteil dieser Methode ist die globale Konvergenz [3], die man für gewöhnlich nicht voraussetzen kann. Zur Konstruktion von $\mathbf{m}^{(n+1)}$ aus $\mathbf{m}^{(n)}$ benötigen wir zuerst eine geeignete Richtung $\mathbf{w}^{(n)}$. Diese befindet sich im Unterraum

$$T_{\mathbf{m}} = \{\mathbf{w} \in H^1(\Omega, \mathbb{R}^3) : \mathbf{w}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{m}(\mathbf{x}) = 0 \text{ fast überall}\} \quad (5.1)$$

von $H^1(\Omega, \mathbb{R}^3)$. Nach [3] ergibt sich eine geeignete Richtung durch folgende Bedingung

$$\begin{cases} \mathbf{w} \in T_{\mathbf{m}}, \\ E'[\mathbf{m}](\psi) = -2 \left(\int_{\Omega} \nabla \mathbf{w} \cdot \nabla \psi + \int_{\Omega} \mathbf{w} \cdot \psi \right), \quad \forall \psi \in T_{\mathbf{m}}. \end{cases} \quad (5.2)$$

Diese stellen wir mit Hilfe von linearen Ansatzfunktionen dar

$$\mathbf{w} = \sum_{i \in I_G} \gamma_i \varphi_i. \quad (5.3)$$

Die erste Bedingung von (5.2) ergibt durch (2.3) und (5.3)

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \boldsymbol{\alpha}_1^T & & \\ & \ddots & \\ & & \boldsymbol{\alpha}_n^T \end{pmatrix}}_{=:B} \underbrace{\begin{bmatrix} \gamma_1 \\ \vdots \\ \gamma_n \end{bmatrix}}_{=:x} = 0, \quad (5.4)$$

wobei $B \in \mathbb{R}^{n \times 3n}$, $n := |I_G|$. Als Approximation an den Raum (5.1) nehmen wir die Basis

$$T_{\mathbf{m}} \approx ((\mathbf{e}_i^k \varphi_i)_{k \in \{1,2\}, i \in I_G}),$$

wobei \mathbf{e}_i^1 und \mathbf{e}_i^2 die Einheitsvektoren sind, die den Unterraum $T_{\mathbf{m}}^i$ aufspannen:

$$T_{\mathbf{m}}^i = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3 : \mathbf{x} \cdot \boldsymbol{\alpha}_i = 0\}.$$

Aus der zweiten Bedingung von (5.2) ergibt sich mit Hilfe der linearen Ansatzfunktionen (2.3) und (5.3)

$$\begin{aligned} 0 &= 2 \int_{\Omega} \sum_{i \in I_G} (\boldsymbol{\gamma}_i \nabla \varphi_i^T) \cdot (\mathbf{e}_l^k \nabla \varphi_l^T) + \sum_{i \in I_G} (\boldsymbol{\gamma}_i \varphi_i) \cdot \mathbf{e}_l^k \varphi_l \, d\mathbf{x} + E'[\mathbf{m}](\mathbf{e}_l^k \varphi_l) \\ &= 2 \sum_{i \in I_G} \int_{\Omega} \text{spur}(\nabla \varphi_l (\mathbf{e}_l^k)^T \boldsymbol{\gamma}_i \nabla \varphi_i^T) + \boldsymbol{\gamma}_i \cdot \mathbf{e}_l^k \varphi_i \varphi_l \, d\mathbf{x} + E'[\mathbf{m}](\mathbf{e}_l^k \varphi_l) \\ &= 2 \sum_{i \in I_G} \int_{\Omega} \nabla \varphi_i^T \nabla \varphi_l (\mathbf{e}_l^k)^T \boldsymbol{\gamma}_i + \varphi_i \varphi_l (\mathbf{e}_l^k)^T \boldsymbol{\gamma}_i \, d\mathbf{x} + E'[\mathbf{m}](\mathbf{e}_l^k \varphi_l), \end{aligned}$$

mit $k \in \{1, 2\}$ und $l \in I_G$. Wir erhalten

$$\sum_{i \in I_G} \underbrace{\left(\int_{\Omega} \nabla \varphi_i^T \nabla \varphi_l + \varphi_i \varphi_l \, d\mathbf{x} (\mathbf{e}_l^k)^T \right)}_{=:A_{k,l,i}} \boldsymbol{\gamma}_i = \underbrace{-\frac{1}{2} E'[\mathbf{m}](\mathbf{e}_l^k \varphi_l)}_{=:C_{k,l}}, \quad (5.5)$$

die Matrix $A \in \mathbb{R}^{2n \times 3n}$. Somit ergibt sich mit

$$\begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} \mathbf{x} = \begin{bmatrix} \mathbf{c} \\ 0 \end{bmatrix}$$

ein lineares Gleichungssystem mit $\begin{bmatrix} A^T & B^T \end{bmatrix}^T \in \mathbb{R}^{3n \times 3n}$. Durch den Diskretisierungsfehler ist es jedoch möglich, dass der Vektor $\begin{bmatrix} \mathbf{c}^T & 0 \end{bmatrix}^T$ nicht mehr im Bild liegt, selbst wenn das Ausgangsproblem (5.2) lösbar ist. Wir fassen deshalb unsere Bedingung (5.2) als restringierte Variationsgleichung auf und ordnen ihr eine erweiterte Variationsgleichung ohne Nebenbedingungen zu.

Es seien V, W reelle Hilbert-Räume. Dazu sind zwei stetige Bilinearformen $a(\cdot, \cdot) : V \times V \rightarrow \mathbb{R}$ und $b(\cdot, \cdot) : V \times W \rightarrow \mathbb{R}$ gegeben. Wir definieren

$$\tilde{V} := \{u \in V : b(u, v) = 0 \quad \forall v \in W\}.$$

Weiterhin sei $f \in V'$ ein stetiges, lineares Funktional. Somit können wir das Problem (5.2) verallgemeinern. Wir suchen ein $u \in \tilde{V}$, so dass

$$a(u, v) = f(v), \quad \forall v \in \tilde{V}. \quad (5.6)$$

Nun stellen wir eine erweiterte Variationsgleichung auf, bei der wir ein $(u, \lambda) \in V \times W$ suchen mit

$$\begin{aligned} a(u, v) + b(v, \lambda) &= f(v), & \forall v \in V, \\ b(u, w) &= 0, & \forall w \in W. \end{aligned} \quad (5.7)$$

Ist nun $(u, \lambda) \in V \times W$ eine Lösung der erweiterten Variationsgleichung (5.7), so löst u auch die restringierte Variationsgleichung (5.6). Ein Beweis dazu befindet sich für eine allgemeinere Form in [15].

Unser Ziel ist es, die erweiterte Variationsgleichung (5.7) auf unser Problem (5.2) zu übertragen und somit ein Sattelpunktproblem der Form

$$\begin{bmatrix} \tilde{A} & B^T \\ B & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{c} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (5.8)$$

zu erhalten. Aus der ersten Bedingung von (5.7) folgt analog zu (5.5)

$$\tilde{A}_{k,l,i} = \int_{\Omega} \nabla \varphi_i^T \nabla \varphi_l + \varphi_i \varphi_l \, d\mathbf{x} \, \mathbf{e}_k^T \quad \text{und} \quad \mathbf{c}_{k,l} = -\frac{1}{2} E'[\mathbf{m}](\mathbf{e}_k \varphi_l), \quad (5.9)$$

mit $k = \{1, 2, 3\}$ und $l, i \in I_G$. Die zweite Bedingung von (5.7) entspricht dabei der vom restringierten Problem (5.4). Das Gleichungssystem (5.8) lässt sich anschließend zum Beispiel durch das Verfahren von Uzawa [15] lösen.

Vorgabe $\mathbf{y}^{(0)}$ und Wahl $\alpha > 0$
for $k=1,2,3,\dots$ **do**
 $\mathbf{x}^{(k)} = \tilde{A}^{-1} (\mathbf{c} - B^T \mathbf{y}^{(k-1)})$
 $\mathbf{y}^{(k)} = \mathbf{y}^{(k-1)} + \alpha B \mathbf{x}^{(k)}$

Algorithmus 5.1: Uzawa-Algorithmus

Eine effiziente Berechnung von $\mathbf{c}_{k,l}$ in (5.9) ist wichtig. Berechnet man die Ableitung der mikromagnetischen Energie auf dem gesamten Gebiet Ω , wie in (2.5), (2.9), (2.11)

und (3.6) beschrieben, so benötigt man für einen Eintrag \mathbf{c}_{kl} $\mathcal{O}(rn \log n)$ Operationen. Die Ordnung der Operationen entspricht dem Aufwand für einen Matrix-Vektor-Multiplikation mit einer Matrix $M \in \mathcal{H}(T_{I \times I, r})$, siehe 4.2. Für den gesamten Vektor \mathbf{c} kommt man somit auf $\mathcal{O}(rn^2 \log n)$. Bei numerischen Experimenten zeigt sich, dass die Erstellung der rechten Seite von (5.8) selbst bei kleineren Beispielen einen Großteil der Gesamtrechnenzeit in Anspruch nimmt. Man kann jedoch leicht sehen, dass dieser Aufwand nicht notwendig ist. Da immer nur eine lineare Ansatzfunktion in (5.9) einen Beitrag leistet, werden wir die Ableitung der Energie elementweise berechnen. So vereinfachen sich (2.5), (2.9), (2.11) und (3.6) zu

$$\begin{aligned}
E'_z(\mathbf{m})(\mathbf{e}_k \varphi_l) &= \mu_0 \mathbf{e}_k \cdot \int_{\Omega} \mathbf{f} \varphi_l \, d\mathbf{x}, \\
E'_a(\mathbf{m})(\mathbf{e}_k \varphi_l) &= -K_u \mathbf{e}_k \cdot \mathbf{e} \sum_{i \in I_G} (\boldsymbol{\alpha}_i \mathbf{e}) \int_{\Omega} \varphi_i \varphi_l \, d\mathbf{x}, \\
E'_e(\mathbf{m})(\mathbf{e}_k \varphi_l) &= 2c_{\text{ex}} \mathbf{e}_k \cdot \sum_{i \in I_G} \boldsymbol{\alpha}_i \int_{\Omega} \nabla \varphi_i^T \nabla \varphi_l \, d\mathbf{x}, \\
E'_s(\mathbf{m})(\mathbf{e}_k \varphi_l) &= \mu_0 \left(\mathbf{e}_k \cdot \sum_{i \in I_I} \beta_i \int_{\Omega} \varphi_l \nabla \varphi_i \, d\mathbf{x} - \mathbf{e}_k \cdot \sum_{i \in I_S} \beta_i \mathbf{a}_{li} + \mathbf{e}_k \cdot \sum_{i \in I_A} B_{li} \boldsymbol{\alpha}_i \right. \\
&\quad \left. + \mathbf{e}_k \cdot \sum_{i \in I_S} \beta_i \mathbf{c}_{li} - \mathbf{e}_k \cdot \sum_{i \in I_A} D_{li} \boldsymbol{\alpha}_i \right).
\end{aligned} \tag{5.10}$$

Die Bezeichnung der Matrizen zur Berechnung der Ableitung der Streufeldenergie ist die gleiche wie in (3.18). Der Aufwand zur Erzeugung von \mathbf{c} in (5.9) hat sich somit wesentlich reduziert von $\mathcal{O}(rn^2 \log n)$ auf $\mathcal{O}(rn \log n)$.

Nachdem wir nun eine Richtung $\mathbf{w}^{(n)}$ haben, ergibt sich die Aktualisierung der Magnetisierung durch

$$\mathbf{m}^{(n+1)}(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{m}^{(n)}(\mathbf{x}) + \lambda_n \mathbf{w}^{(n)}(\mathbf{x})}{|\mathbf{m}^{(n)}(\mathbf{x}) + \lambda_n \mathbf{w}^{(n)}(\mathbf{x})|}, \tag{5.11}$$

wobei λ_n einen geeigneten Wert darstellt. Durch die Normierung in (5.11) ist unsere Nebenbedingung $|\mathbf{m}(\mathbf{x})| = 1$ gesichert.

5.2 Nichtlineares Verfahren der konjugierten Gradienten

Das nichtlineare Verfahren der konjugierten Gradienten (CG-Verfahren) benötigt analog zum Alouges-Verfahren den Gradienten der Energie und kann somit mit geringem

Aufwand zusätzlich implementiert werden. Eine Variante des CG-Verfahrens wird in [2] präsentiert. Die Nebenbedingung $|\mathbf{m}(\mathbf{x})| = 1$ erreichen wir jedoch nicht durch Kugelkoordinaten, sondern durch anschließende Normierung.

Vorgabe $\mathbf{m}^{(0)}, \mathbf{p}^{(0)}$
for $k=0,1,2,\dots$ **do**
 Minimierung $E(\mathbf{m}^{(k)} + \alpha_k \mathbf{p}^{(k)})$ (Line Search)
 $\mathbf{m}^{(k+1)} = \frac{\mathbf{m}^{(k)} + \alpha_k \mathbf{p}^{(k)}}{|\mathbf{m}^{(k)} + \alpha_k \mathbf{p}^{(k)}|}$
 $\beta_{k+1} = \frac{|\nabla E(\mathbf{m}^{(k+1)})|^2}{|\nabla E(\mathbf{m}^{(k)})|^2}$
 $\mathbf{p}^{(k+1)} = -\nabla E(\mathbf{m}^{(k+1)}) + \beta_{k+1} \mathbf{p}^{(k)}$

Algorithmus 5.2: nichtlineares CG-Verfahren

Bei der Bestimmung von β_{k+1} in Algorithmus 5.2 bietet die Fletcher-Reeves-Formel selbst bei inexaktem Line-Search globale Konvergenz, siehe [16]. Jedoch kann man alternativ auch die Polak-Ribière- oder die Hestenes-Stiefel-Methode wählen. Beim inexakten Line Search verwendet man für gewöhnlich die Wolfe-Bedingungen [16],

$$\begin{aligned} E(\mathbf{m}^{(k)} + \alpha_k \mathbf{p}^{(k)}) &\leq E(\mathbf{m}^{(k)}) + c_1 \alpha_k \nabla E(\mathbf{m}^{(k)}) \cdot \mathbf{p}^{(k)}, \\ \nabla E(\mathbf{m}^{(k)} + \alpha_k \mathbf{p}^{(k)}) \cdot \mathbf{p}^{(k)} &\geq c_2 \nabla E(\mathbf{m}^{(k)}) \cdot \mathbf{p}^{(k)}, \end{aligned}$$

mit $0 < c_1 < c_2 < 1$ und einer Schrittweite $\alpha_k > 0$. Geeignete Werte für die Konstanten sind $c_1 = 10^{-4}$ und $c_2 = 0.9$, siehe [17].

Kapitel 6

Das Testen der Algorithmen

Bei der Implementierung der Algorithmen wurde die Programmiersprache C++ verwendet. Für elementare Operationen und zur Lösung linearer Gleichungssysteme kamen BLAS- und LAPACK-Routinen zum Einsatz. Weiterhin wurde die Softwarebibliothek AHMED¹ verwendet, so dass wir \mathcal{H} -Matrizen abspeichern und per ACA-Verfahren erstellen konnten. Zur Erzeugung der Abbildungen 8.1 - 8.6 kamen OpenGL-Routinen zum Einsatz. Die Zerlegung verschiedener Geometrien wurde mittels Netgen² erledigt. Sämtliche numerische Rechnungen wurden auf einem Rechner mit 16 GB Hauptspeicher und zwei Intel Xeon 5160 Prozessoren durchgeführt. Bei Zeitmessungen haben wir Parallelisierungen ausgeschaltet und nur auf einem Kern gerechnet, um Nebeneffekte zu vermeiden.

Um die Algorithmen und deren Implementierung zur Berechnung der einzelnen Teilenergien zu testen, benötigt man verschiedene Beispiele, bei denen die Lösungen der Probleme bekannt sind. Die Zeemanenergie und die anisotrope Energie sind am einfachsten zu überprüfen, da sich diese Teilenergien exakt für bestimmte Magnetisierungen berechnen lassen. Hingegen ist es ein Problem, nicht-triviale Beispiele für die Streufeldenergie zu finden, deren exakte Ergebnisse bekannt sind. Im Folgenden konzentrieren wir uns zuerst auf die Berechnung der Austausch- und der Streufeldenergie und danach wenden wir uns der Energieminimierung in dem μ MAG Standardproblem Nr. 3 zu, bei der die anisotrope Energie, die Austauschenergie und die Streufeldenergie zusammenwirken.

Im letzten Abschnitt beschäftigen wir uns mit der Laufzeit des Programms. Dabei beschränken wir uns auf die Erzeugung der vollbesetzten Matrizen und die einzelnen Minimierungsschritte, da diese die Gesamtlaufzeit dominieren. Im Wesentlichen soll gezeigt werden, dass quasi-lineare Komplexität vorliegt. Anschließend untersuchen wir den Einfluss des Approximationsfehlers.

¹<http://bebendorf.ins.uni-bonn.de/AHMED.html>

²<http://www.hpfem.jku.at/netgen/>

6.1 Austauschenergie

Wir verwenden als Geometrie einen Einheitswürfel und eine inhomogene Magnetisierung

$$\mathbf{m} = \begin{pmatrix} 0 \\ \sin(2\pi x) \\ \cos(2\pi x) \end{pmatrix}.$$

Es ergibt sich für die Austauschenergie als exakten Wert

$$\int_{(0,1)^3} |\nabla \mathbf{m}|^2 d\mathbf{x} = 4\pi^2.$$

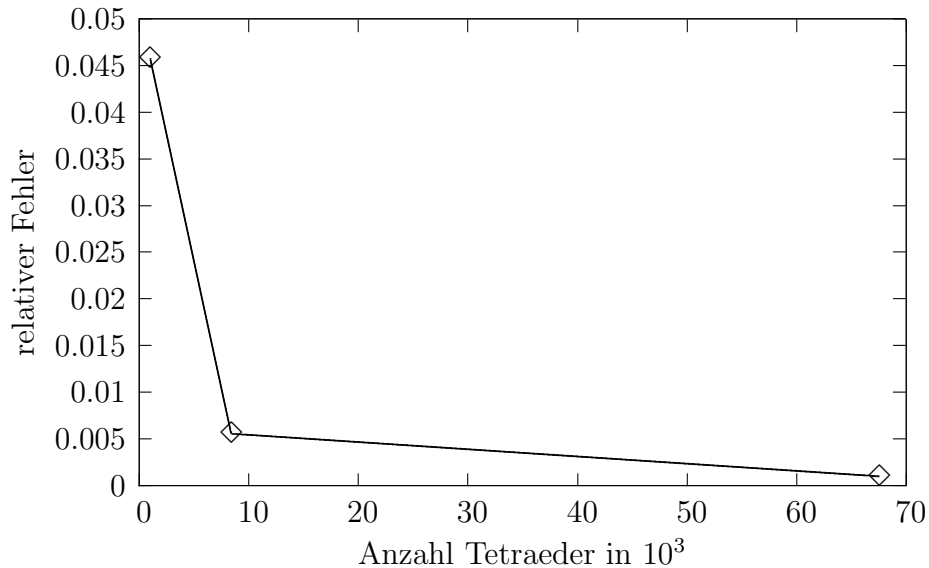


Abbildung 6.1: Relativer Fehler der Austauschenergie des Einheitswürfels

Die numerischen Berechnungen liefern bereits ab ca. 8000 Tetraedern einen relativen Fehler von weniger als einem Prozent, siehe Abbildung 6.1. Leider kann der relative Fehler nur für 3 Diskretisierungsstufen angegeben werden. Um verschiedene Resultate miteinander vergleichen zu können, muss man von derselben Diskretisierung ausgehend verfeinern. Eine Verfeinerung bedeutet jedoch eine Verachtfachung der Anzahl der Tetraeder, so dass wir schnell an die Grenzen der verfügbaren Hardware stoßen. Ähnliches gilt auch für Abbildung 6.2.

6.2 Streufeldenergie

Eine Möglichkeit zum Testen der Streufeldenergie ist es, als Geometrie einen Einheitswürfel und dazu eine divergenzfreie Magnetisierung zu wählen. Dabei ergibt sich für die Streufeldenergie

$$\int_{(0,1)^3} \mathbf{m} \cdot \nabla u \, d\mathbf{x} = \frac{1}{3},$$

siehe [18]. Das Integrationsgebiet kann exakt in Tetraeder zerlegt werden und die Genauigkeit hängt hauptsächlich von der Berechnung der singulären Integrale (3.18) ab. Durch Verwendung der Duffy-Transformation liegt der relative Fehler für E_s bei $3.6 \cdot 10^{-6}$, wobei der Würfel in 132 Tetraeder zerlegt wurde.

In einem weiteren Test beschränken wir uns auf eine Kugel mit dem Radius $R = 1$. Um die Geometrie auszunutzen, wählen wir die Magnetisierung so, dass sie nur vom Radius r abhängt

$$\mathbf{m} = r \mathbf{e}_r.$$

Es bezeichnet \mathbf{e}_r den Einheitsvektor bezüglich r . Die Divergenz von \mathbf{m} ist in Kugelkoordinaten

$$\operatorname{div} \mathbf{m} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial(r^2 m_r)}{\partial r} + \frac{1}{r \sin \vartheta} \frac{\partial(\sin \vartheta m_\vartheta)}{\partial \vartheta} + \frac{1}{r \sin \vartheta} \frac{\partial m_\varphi}{\partial \varphi} = 3,$$

mit $\mathbf{m}(r, \vartheta, \varphi) = m_r \mathbf{e}_r + m_\vartheta \mathbf{e}_\vartheta + m_\varphi \mathbf{e}_\varphi$. Somit ergibt sich für den Laplace-Operator und das Randwertproblem (3.1)

$$\Delta u(r) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial u}{\partial r} \right) = 3.$$

Durch Umformungen erhalten wir

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial u}{\partial r} \right) &= 3r^2, \\ r^2 \frac{\partial u}{\partial r} &= r^3 + c_1, \\ \frac{\partial u}{\partial r} &= r + \frac{c_1}{r^2}, \\ u &= \frac{r^2}{2} - \frac{c_1}{r} + c_2. \end{aligned}$$

Die Sprungbedingungen (3.2) liefern

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial r} &= -\mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\nu} \\ &= -r, \end{aligned}$$

und somit $c_1 = 0$. Für das Potential folgt

$$u = \begin{cases} \frac{r^2}{2} + c_2 & \text{in } \Omega \\ \frac{1}{2} + c_2 & \text{in } \bar{\Omega}^c \end{cases}.$$

Die Streufeldenergie ist also in diesem Fall

$$\int_{-\pi}^{\pi} \int_0^{\pi} \int_0^1 r \mathbf{e}_r \cdot \mathbf{e}_r r^3 \sin \vartheta \, dr \, d\vartheta \, d\varphi = \frac{4}{5}\pi.$$

Die Resultate aus den numerischen Berechnungen sind in Abbildung 6.2 dargestellt und stimmen bereits ab einer Diskretisierung von ca. 18000 Tetraedern so gut mit dem exakten Resultat überein, dass der relative Fehler unter einem Prozent liegt.

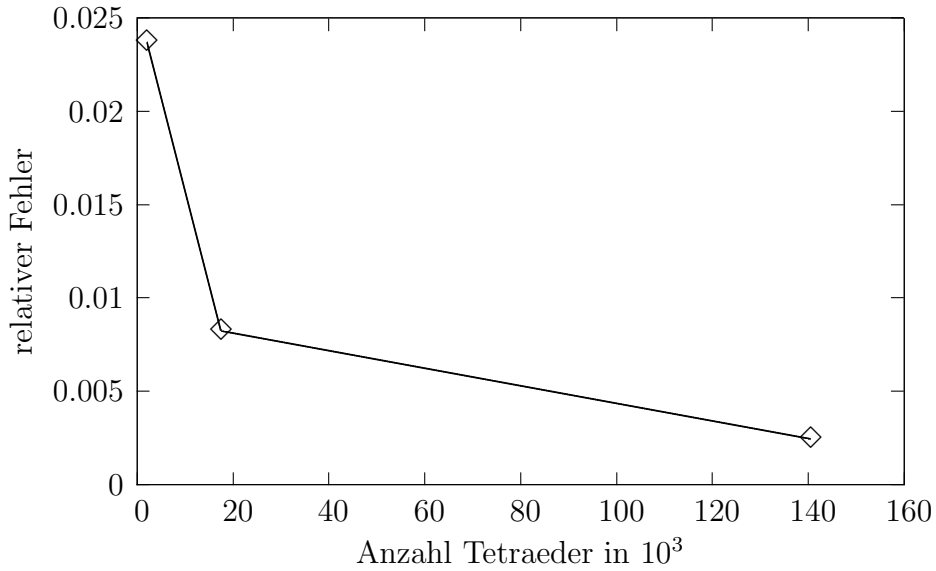


Abbildung 6.2: Relativer Fehler der Streufeldenergie der Einheitssphäre

6.3 μ MAG Standardproblem Nr. 3

Nachdem wir die einzelnen Energien mit bestimmten Geometrien und Magnetisierungssettings getestet haben, benötigen wir ein nicht-triviales Beispiel zur Überprüfung der Energieminimierung. In [18] wird das sogenannte μ MAG Standardproblem Nr. 3 vorgeschlagen. Bei diesem Problem ist es das Ziel, die Länge L eines Würfels so zu bestimmen, dass die beiden Energieminima, der Flower- und der Vortex-Status die gleiche Gesamtenergie aufweisen. Der Flower-Status ist ein fast homogener Zustand, wohingegen der

Vortex-Status eine inhomogenes Bild aufweist. L wird dabei in Einheiten von $l_{ex} := \frac{c_{ex}}{K_m}$ gemessen und sollte sich nach [4] in der Nähe von 8 befinden. Dabei ist $K_m := \frac{1}{2}\mu_0$ die magnetostatische Energiedichte. Alle Energien werden in Einheiten von K_m und pro Volumen angegeben. Die Anisotropiekonstante beträgt $K_u = 0.1K_m$ und die kristallographische Achse verläuft entlang einer der Hauptachsen des Würfels. Die Zeeman-Energie wird in diesem Test vernachlässigt. In unseren Berechnungen wurde $c_{ex} = K_m$ gesetzt. Der Vorteil dieses Tests ist es, dass sämtliche Energien und Längen in reduzierten Einheiten angegeben werden. Somit kann ein Materialparameter frei gewählt und anschließend die einzelnen Energien bezüglich der reduzierten Länge verglichen werden.

Für Probleme dieser Art erweist sich der verfügbare Arbeitsspeicher meist als limitierender Faktor. Vor allem die vollbesetzten Matrizen machen den größten Teil dessen aus. Aus diesem Grund werden wir im Folgenden verschiedene relative Genauigkeiten und die dazugehörige Kompressionsrate durch das ACA-Verfahren und den Speicherbedarf durch die Abspeicherung in \mathcal{H} -Matrizen betrachten.

Das Energieminimum hängt immer von dem Ausgangszustand der Magnetisierung ab. Für den Flower-Status wurde im Ursprungssetting die Magnetisierung entlang der kristallographischen Achse ausgerichtet. In der Ausgangskonfiguration des Vortex-Status ist die Magnetisierung entlang der Tangenten eines Kreises in der y-z-Ebene ausgerichtet, siehe Abbildung 6.3.

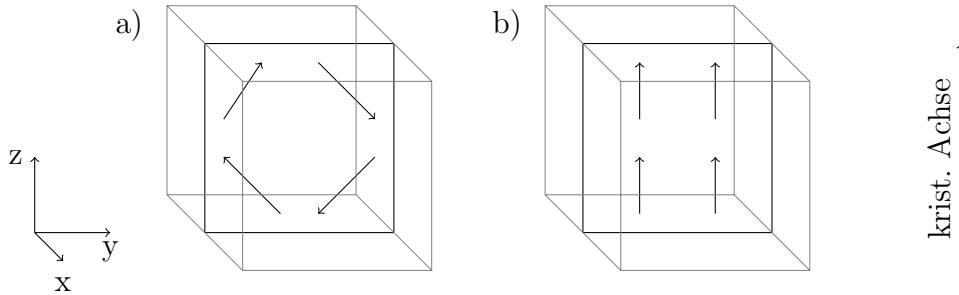


Abbildung 6.3: Initialisierungssetting nach [4] a) Vortex, b) Flower

Zuerst betrachten wir einen Würfel, der in 8448 Tetraeder und 1664 Oberflächendreiecke zerlegt wurde, siehe Tabellen 8.1, 8.2 und 8.3. Der Gesamtspeicherbedarf der vollbesetzten Matrizen ist für Werte mit doppelter Genauigkeit 682.5 MB. Durch Verwendung von \mathcal{H} -Matrizen reduziert sich dieser, je nach Genauigkeit, auf 37.6% bis 49.9%. Man sollte beachten, dass die Problemgröße noch relativ klein gewählt ist und somit die Kompressionsrate dementsprechend schlecht ausfällt im Vergleich zu größeren Beispielen. Die Energieminimierung erweist sich auch bei geringer Genauigkeit als stabil.

Als nächstes nehmen wir einen Würfel, zerlegt in 67584 Tetraeder und 6656 Oberflächendreiecke, siehe Tabellen 8.4, 8.5 und 8.6. Der unkomprimierte Speicherbedarf beträgt

17784 MB. Die Kompressionsrate ist in diesem Fall zwischen 8.4% und 15.4%. Die Gesamtenergien des Flower- und des Vortex-Status stimmen in unserem Fall bei einer reduzierten Länge von 8.2 überein, siehe Abbildung 6.4. Auffällig ist, dass unsere Ergebnisse für den Vortex-Status sehr gut mit denen anderer Arbeitsgruppen aus [4] übereinstimmen. Beim Flower-Status, der hauptsächlich durch die Streufeldenergie bestimmt wird, ist unser Energieminimum jedoch größer als die Literaturwerte [4]. Die dort verwendete Methode und die erreichte Genauigkeit zur Bestimmung der Streufeldenergie ist uns nicht bekannt. Die Vorgabe von $L \approx 8$ wurde erfüllt.

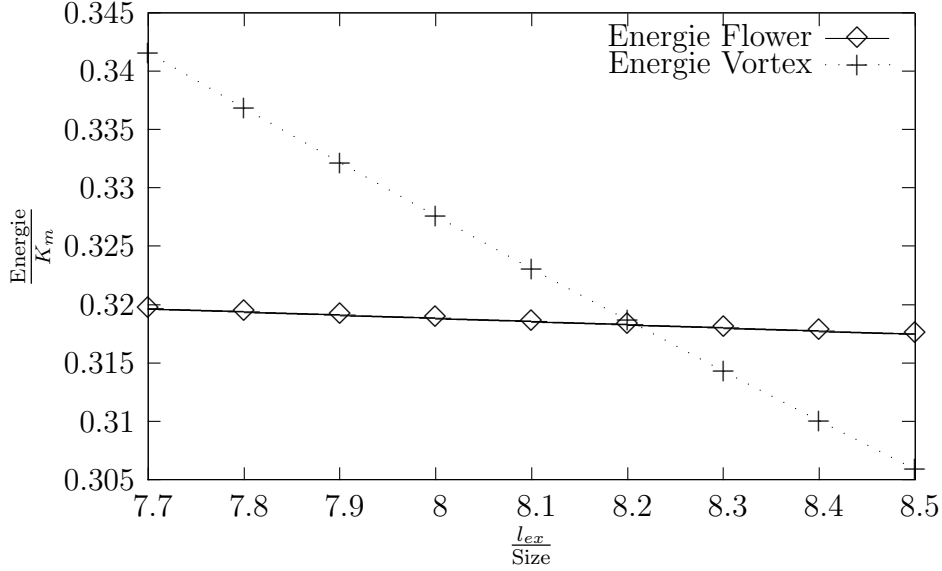


Abbildung 6.4: Vergleich der Energie des Flower- und des Vortex-Status

Die Abbildungen 8.1 - 8.6 zeigen jeweils den Flower- und den Vortex-Status für einen Würfel mit 8448 Tetraedern und 1664 Oberflächendreiecken. Die Pfeile repräsentieren die Magnetisierung und verschiedene Farben stellen unterschiedliche Richtungen im Raum dar. Sämtliche Abbildungen sind aus derselben Perspektive gemacht. Interessant ist vor allem, dass beim Vortex-Status auf der Frontseite, siehe Abbildung 8.2, ein sich schließender Wirbel und auf der Rückseite, siehe Abbildung 8.3, ein sich öffnender Wirbel zu erkennen ist. Im Mittelpunkt der Abbildungen befindet sich eine mikromagnetische Singularität und die Magnetisierung besitzt dort keine eindeutige Richtung. Oftmals wird diese Singularität als Bloch-Punkt oder Feldtkeller-Singularität bezeichnet, siehe [18]. Da in unserem Modell die Magnetisierung durch die Nebenbedingung $|\mathbf{m}| = 1$ festgelegt ist, ergibt sich in diesem Punkt ein Fehler bei der Berechnung der einzelnen Teilenergien. Dieser Fehler wird jedoch mit zunehmender Verfeinerung der Diskretisierung kleiner und kann somit vernachlässigt werden [18].

6.4 Zeitmessungen

Die Zeit zur Erzeugung der vollbesetzten Matrizen resultierend aus (3.22), (3.25), (3.27) und (3.28) trägt wesentlich zur Gesamtlaufzeit bei. Bei den Abbildungen 6.5 und 6.6 wurde die Genauigkeit auf $\varepsilon = 0.1$ gesetzt. Zu beachten ist, dass die Werte auf Grund der Dimension der Matrizen einmal in Abhängigkeit von der Anzahl der Oberflächenelemente und ein anderes Mal in Abhängigkeit von der Anzahl der Tetraeder dargestellt sind. Es lässt sich gut die quasi-lineare Komplexität erkennen.

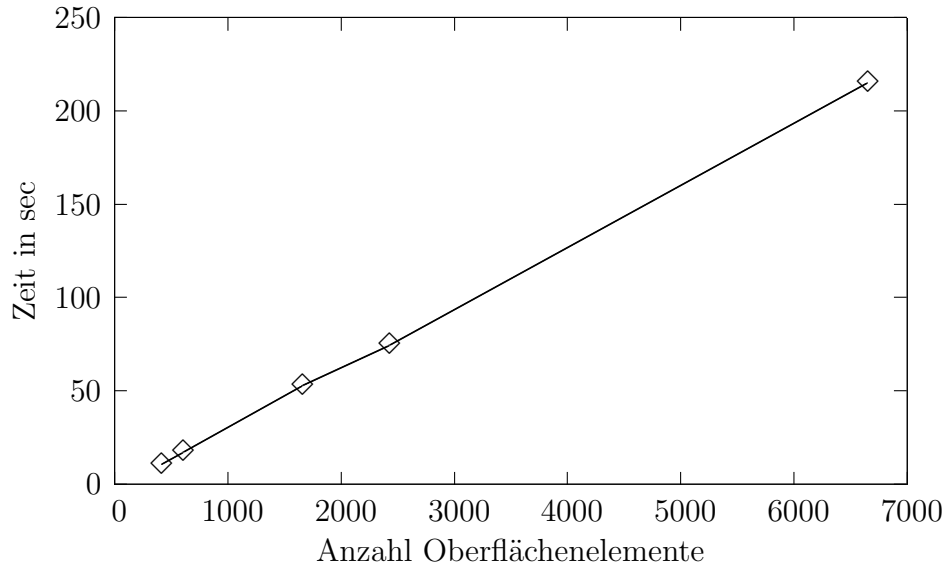


Abbildung 6.5: Zeit zur Erzeugung der aus (3.27) und (3.28) resultierenden Matrizen

Eine weitere wesentliche Rolle bei der Gesamtlaufzeit des Programms spielt die Minimierung der mikromagnetischen Energie. Hierbei betrachten wir einen einzelnen Minimierungsschritt des Alouges-Verfahrens mit einer Genauigkeit von $\varepsilon = 0.1$, siehe Abbildung 6.7. Es ist zu erkennen, dass die Komplexität nicht linear verläuft. Um genauere Aussagen zu machen, betrachten wir die Zeit für einen Minimierungsschritt pro Tetraeder, siehe 6.8. Dadurch wird der Logarithmus nicht durch die lineare Funktion überdeckt. Messwerte von Diskretisierungen mit weniger als ca. 10000 Tetraeder liegen offensichtlich im preasymptotischen Bereich und können daher bei der Betrachtung der Gesamtkomplexität vernachlässigt werden. Am besten konnten wir die Messwerte durch eine Funktion der Ordnung $\mathcal{O}(\log^4 n)$ fitten. Somit ist anzunehmen, dass die Gesamtkomplexität bei $\mathcal{O}(n \log^4 n)$ liegt. Das Ziel der quasi-linearen Komplexität ist erfüllt.

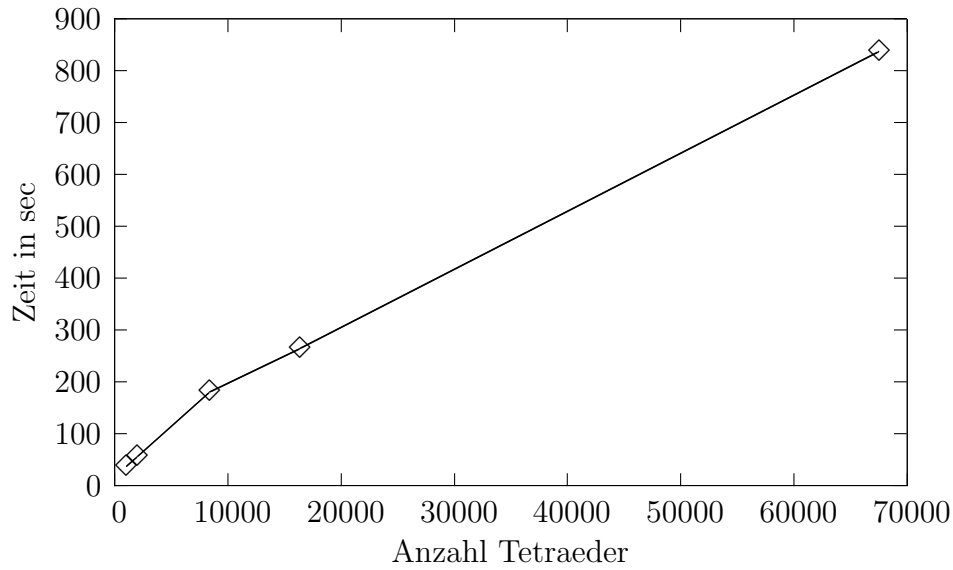


Abbildung 6.6: Zeit zur Erzeugung der aus (3.22) und (3.25) resultierenden Matrizen

6.5 Speicherbedarf

Neben der benötigten Zeit spielt auch der Speicherbedarf eine große Rolle bei der Berechnung der mikromagnetischen Energie. Die einträgsweise Abspeicherung der vollbesetzten Matrizen hat eine Komplexität von $\mathcal{O}(n^2)$. Somit erhalten wir selbst bei einfachen Beispielen wie dem μ MAG Standardproblem Nr. 3 bei fein gewählten Diskretisierungen einen Speicherverbrauch von mehreren Gigabyte und stoßen an die Grenze der derzeit verfügbaren Hardware.

\mathcal{H} -Matrizen hingegen bieten mit dem ACA-Verfahren, bei asymptotisch glatten Kernfunktionen wie dem Newton-Potential, eine quasi-lineare Komplexität beim Speicherbedarf.

In den Abbildungen 6.9 und 6.10 betrachten wir einen Würfel mit verschiedenen Verfeinerungsstufen. Die Genauigkeit der Approximation liegt bei $\varepsilon = 0.1$. Die quasi-lineare Komplexität des Speicherbedarfs ist gut zu erkennen.

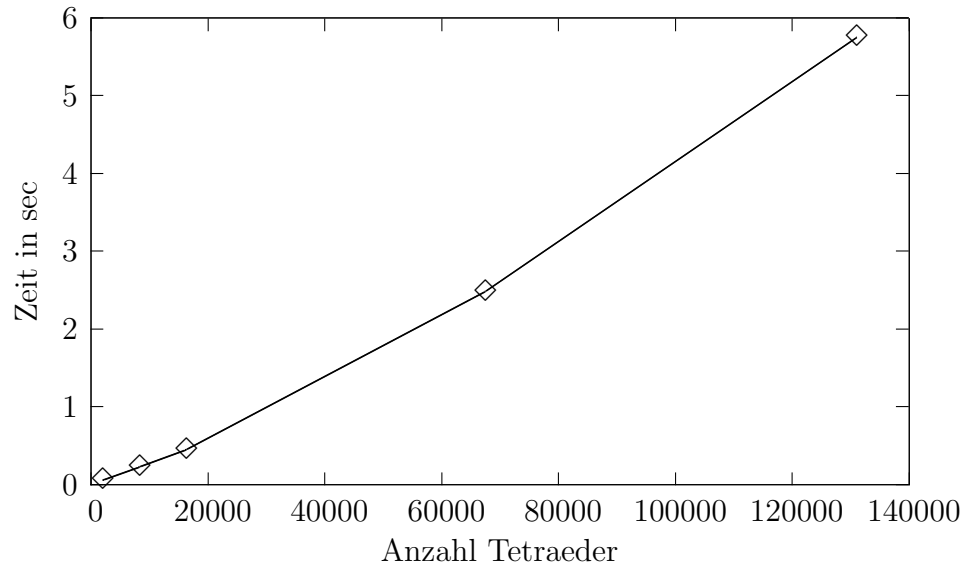


Abbildung 6.7: Gesamtzeit pro Minimierungsschritt

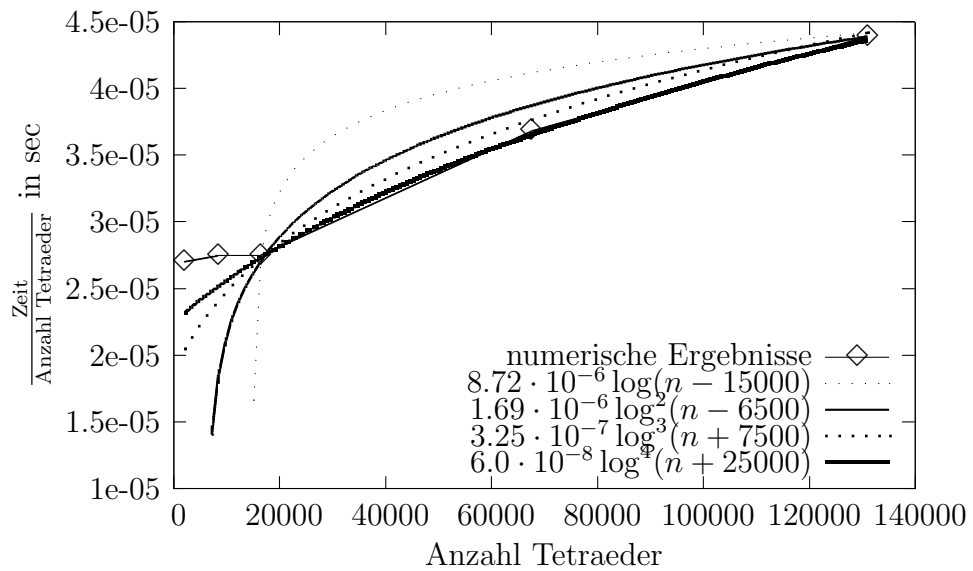


Abbildung 6.8: Gesamtzeit pro Minimierungsschritt und Tetraeder

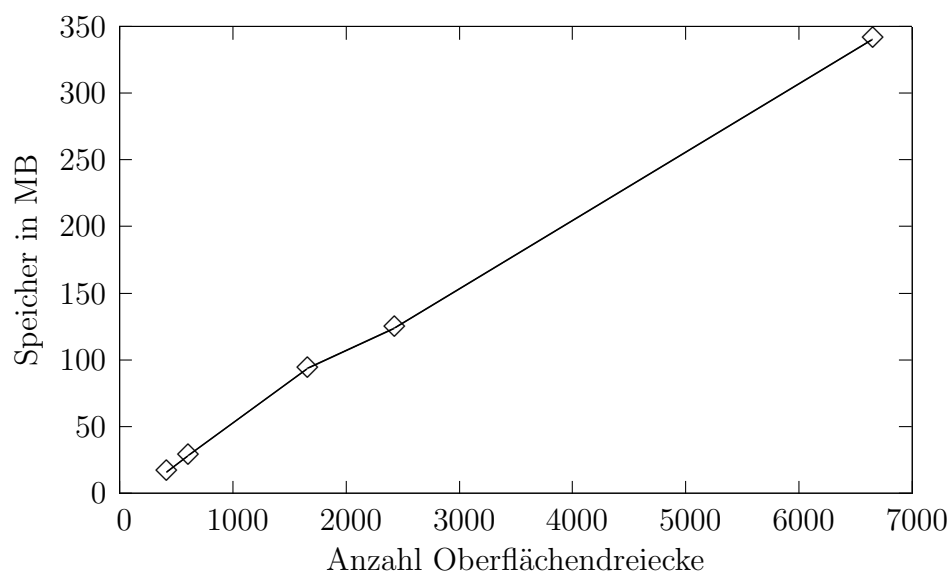


Abbildung 6.9: Speicherbedarf zur Erzeugung der aus (3.27) und (3.28) resultierenden Matrizen

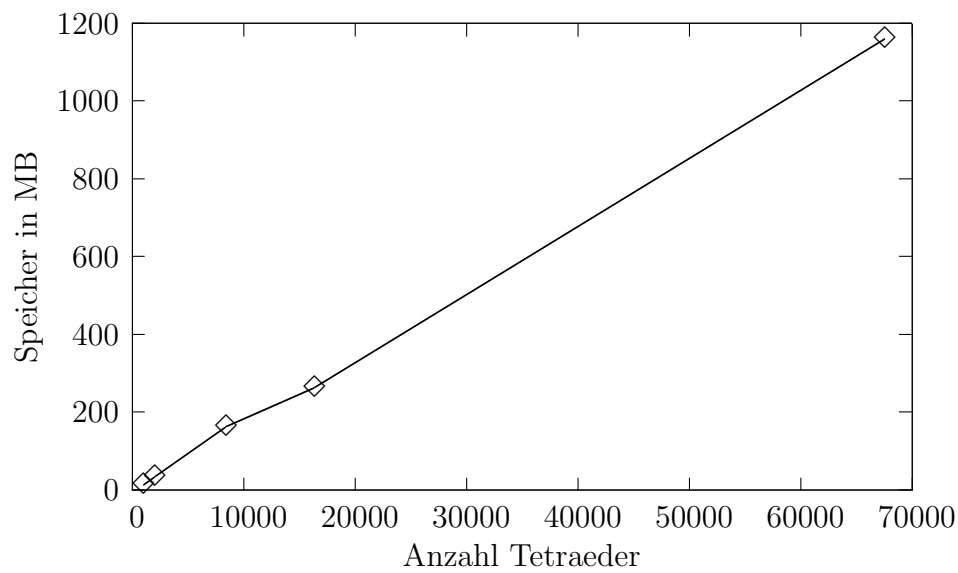


Abbildung 6.10: Speicherbedarf zur Erzeugung der aus (3.22) und (3.25) resultierenden Matrizen

Kapitel 7

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden mehrere Verfahren zur Berechnung und Minimierung der mikromagnetischen Energie vorgestellt. Vor allem wurde darauf Wert gelegt, moderne und effiziente Algorithmen zu verwenden.

Zum Einsatz kam ein gemischter Ansatz aus Finite-Elemente- und Randelemente-Methode. Die vollbesetzten Matrizen wurden als \mathcal{H} -Matrizen abgespeichert und mit Hilfe des ACA-Verfahrens erzeugt. Bei der Berechnung des Einfachschichtpotentials zur Lösung der homogenen Poisson-Gleichung verwendeten wir die Duffy-Transformation um die Kernfunktion zu glätten, so dass wir im Anschluss die Gauß-Integration einsetzen konnten. Zur Minimierung der mikromagnetischen Energie nutzten wir das Alouges-Verfahren und ein nichtlineares Verfahren der konjugierten Gradienten.

Insgesamt ist es uns als erste Forschungsgruppe gelungen, die Berechnung und Minimierung der mikromagnetischen Energie mit einer quasi-linearen Gesamtkomplexität durchzuführen. Dies betrifft sowohl die Laufzeit als auch den Speicherbedarf.

Die Algorithmen und deren Implementierungen wurden an mehreren Standardbeispielen getestet. Die Vorgabe der quasi-linearen Komplexität konnte in numerischen Simulationen bestätigt werden.

Kapitel 8

Ausblick

Für die Zukunft bieten sich verschiedene Möglichkeiten, die bisherige Arbeit zu vertiefen oder zu erweitern. So erscheint es sinnvoll, weitere Testbeispiele zu berechnen. Es lassen sich somit Grenzen der Algorithmen ausloten und gegebenenfalls Verbesserungen einbauen.

Bisherige Betrachtungen beinhalten nur den stationären Fall. Es bietet sich an, die bisherige Arbeit als Basis zu nutzen, um zeitabhängige Probleme zu lösen.

Um die praktische Relevanz zu gewährleisten, könnte man eine Kooperation mit Forschungsgruppen aus anwendungsnahen Fachgebieten zum Beispiel der Physik oder Mineralogie anstreben. Weiterhin ist es möglich, alternative Wege zur Berechnung und Minimierung der mikromagnetischen Energie mit den eigenen zu vergleichen.

Eidesstattliche Erklärung

Ich versichere, dass ich die vorliegende Arbeit selbständig und nur unter Verwendung der angegebenen Quellen und Hilfsmittel angefertigt habe, insbesondere sind wörtliche oder sinngemäße Zitate als solche gekennzeichnet. Mir ist bekannt, dass Zuwiderhandlung auch nachträglich zur Aberkennung des Abschlusses führen kann.

Leipzig, 26. Oktober 2009

Unterschrift

Anhang

Tabelle 8.1: Würfel mit 8448 Tetraedern und 1664 Oberflächendreiecken, $\varepsilon = 0.1$,
Speicherbedarf \mathcal{H} -Matrizen 256.7 MB, Kompressionsrate 37.6%

Größe	Status	Aniso.	Exch.	Streu.	Summe
8.5	Vortex	0.0549089	0.182167	0.0712704	0.308346
8.4	Vortex	0.055173	0.184111	0.0733463	0.31263
8.3	Vortex	0.0554588	0.185991	0.0755592	0.317009
8.2	Vortex	0.0557586	0.187898	0.0778256	0.321482
8.1	Vortex	0.0560948	0.18968	0.080273	0.326048
8.0	Vortex	0.05648	0.19118	0.0830534	0.330713
7.9	Vortex	0.0568796	0.192702	0.0858876	0.335469
7.8	Vortex	0.0572926	0.194246	0.0887754	0.340314
8.5	Flower	0.00165331	0.0054061	0.321012	0.328071
8.4	Flower	0.00155683	0.00520156	0.321423	0.328181
8.3	Flower	0.00147112	0.00502237	0.321793	0.328287
8.2	Flower	0.00138782	0.00484355	0.322159	0.328391
8.1	Flower	0.00131001	0.00467504	0.322507	0.328492
8.0	Flower	0.0012349	0.00450776	0.322848	0.328591
7.9	Flower	0.00116881	0.00436477	0.323153	0.328687
7.8	Flower	0.00110283	0.00421534	0.323463	0.328782

Tabelle 8.2: Würfel mit 8448 Tetraedern und 1664 Oberflächendreiecken, $\varepsilon = 1\text{e-}3$, Speicherbedarf \mathcal{H} -Matrizen 286.0 MB, Kompressionsrate 41.9%

Größe	Status	Aniso.	Exch.	Streu.	Summe
8.5	Vortex	0.0549828	0.181112	0.0715445	0.307639
8.4	Vortex	0.0552594	0.182979	0.0736564	0.311895
8.3	Vortex	0.0555501	0.184851	0.0758422	0.316243
8.2	Vortex	0.0558714	0.186605	0.0782076	0.320684
8.1	Vortex	0.0562119	0.18838	0.0806218	0.325213
8.0	Vortex	0.0565801	0.190037	0.0832211	0.329838
7.9	Vortex	0.0570243	0.191224	0.0863077	0.334556
7.8	Vortex	0.0574849	0.192421	0.0894537	0.339359
<hr/>					
8.5	Flower	0.00196927	0.00601857	0.320593	0.328581
8.4	Flower	0.00184697	0.00576903	0.321084	0.3287
8.3	Flower	0.00173534	0.0055407	0.321538	0.328814
8.2	Flower	0.00163205	0.00532901	0.321964	0.328926
8.1	Flower	0.00153406	0.00512437	0.322375	0.329033
8.0	Flower	0.00144492	0.00493928	0.322754	0.329138
7.9	Flower	0.00135845	0.00475381	0.323127	0.32924
7.8	Flower	0.00128153	0.00459284	0.323465	0.329339

Tabelle 8.3: Würfel mit 8448 Tetraedern und 1664 Oberflächendreiecken, $\varepsilon = 1\text{e-}5$, Speicherbedarf \mathcal{H} -Matrizen 340.6 MB, Kompressionsrate 49.9%

Größe	Status	Aniso.	Exch.	Streu.	Summe
8.5	Vortex	0.0549831	0.18111	0.071531	0.307624
8.4	Vortex	0.055257	0.183001	0.0736218	0.311879
8.3	Vortex	0.0555465	0.184881	0.0757996	0.316227
8.2	Vortex	0.0558644	0.186663	0.0781408	0.320668
8.1	Vortex	0.0562057	0.188431	0.0805607	0.325198
8.0	Vortex	0.0566066	0.189823	0.0833951	0.329824
7.9	Vortex	0.0570258	0.191212	0.0863023	0.33454
7.8	Vortex	0.0574595	0.192619	0.0892634	0.339342
<hr/>					
8.5	Flower	0.0019671	0.00601257	0.320606	0.328586
8.4	Flower	0.00184473	0.00576265	0.321097	0.328705
8.3	Flower	0.00173304	0.00553394	0.321552	0.328818
8.2	Flower	0.00162967	0.00532186	0.321978	0.32893
8.1	Flower	0.00153483	0.00512744	0.322375	0.329037
8.0	Flower	0.00144241	0.0049313	0.322768	0.329142
7.9	Flower	0.00135914	0.00475674	0.323127	0.329243
7.8	Flower	0.00127889	0.00458397	0.32348	0.329342

Tabelle 8.4: Würfel mit 67584 Tetraedern und 6656 Oberflächendreiecken, $\varepsilon = 0.1$, Speicherbedarf \mathcal{H} -Matrizen 1501.2 MB, Kompressionsrate 8.4%

Größe	Status	Aniso.	Exch.	Streu.	Summe
8.5	Vortex	0.055191	0.175087	0.0764603	0.306738
8.4	Vortex	0.0555347	0.176655	0.0787459	0.310936
8.3	Vortex	0.0558967	0.178225	0.0810993	0.315221
8.2	Vortex	0.0562996	0.17961	0.083684	0.319594
8.1	Vortex	0.0567479	0.18078	0.0865273	0.324055
8.0	Vortex	0.0572064	0.182014	0.0893771	0.328598
7.9	Vortex	0.0577267	0.18291	0.0925883	0.333225
7.8	Vortex	0.0583023	0.183547	0.0960816	0.337931
<hr/>					
8.5	Flower	0.00380978	0.0125642	0.304345	0.320719
8.4	Flower	0.00366167	0.012318	0.305027	0.321007
8.3	Flower	0.00351521	0.012067	0.305709	0.321291
8.2	Flower	0.00337548	0.0118284	0.306369	0.321573
8.1	Flower	0.00323798	0.0115869	0.307027	0.321852
8.0	Flower	0.00310543	0.0113522	0.30767	0.322128
7.9	Flower	0.00297819	0.011126	0.308297	0.322401
7.8	Flower	0.00285139	0.0108905	0.30893	0.322672

Tabelle 8.5: Würfel mit 67584 Tetraedern und 6656 Oberflächendreiecken, $\varepsilon = 1e-3$, Speicherbedarf \mathcal{H} -Matrizen 1930.0 MB, Kompressionsrate 10.9%

Größe	Status	Aniso.	Exch.	Streu.	Summe
8.5	Vortex	0.0550919	0.173868	0.0769132	0.305873
8.4	Vortex	0.0554342	0.175445	0.0791617	0.310041
8.3	Vortex	0.055805	0.176912	0.0815798	0.314297
8.2	Vortex	0.0562071	0.17828	0.0841521	0.31864
8.1	Vortex	0.0566493	0.179484	0.0869347	0.323068
8.0	Vortex	0.0571287	0.180526	0.089927	0.327581
7.9	Vortex	0.0576246	0.18158	0.0929694	0.332174
7.8	Vortex	0.0582051	0.182148	0.0964948	0.336848
<hr/>					
8.5	Flower	0.00405524	0.0124773	0.300917	0.317449
8.4	Flower	0.0039086	0.0122783	0.301545	0.317731
8.3	Flower	0.00376569	0.0120817	0.302165	0.318012
8.2	Flower	0.00362441	0.0118806	0.302786	0.318291
8.1	Flower	0.00348745	0.0116839	0.303397	0.318568
8.0	Flower	0.00335519	0.0114932	0.303995	0.318844
7.9	Flower	0.00322284	0.0112919	0.304603	0.319118
7.8	Flower	0.00309575	0.0110986	0.305196	0.31939

Tabelle 8.6: Würfel mit 67584 Tetraedern und 6656 Oberflächendreiecken, $\varepsilon = 1\text{e-}5$, Speicherbedarf \mathcal{H} -Matrizen 2735.3 MB, Kompressionsrate 15.4%

Größe	Status	Aniso.	Exch.	Streu.	Summe
8.5	Vortex	0.0550977	0.173834	0.0769229	0.305855
8.4	Vortex	0.055435	0.175452	0.0791358	0.310023
8.3	Vortex	0.0557984	0.176975	0.0815047	0.314278
8.2	Vortex	0.0562148	0.178233	0.0841739	0.318622
8.1	Vortex	0.0566506	0.179486	0.0869137	0.32305
8.0	Vortex	0.0571232	0.180576	0.0898636	0.327562
7.9	Vortex	0.0576443	0.181445	0.0930676	0.332157
7.8	Vortex	0.0581822	0.182321	0.0963251	0.336829
8.5	Flower	0.0040621	0.0124991	0.300952	0.317513
8.4	Flower	0.00391544	0.0123003	0.30158	0.317796
8.3	Flower	0.00377012	0.0120963	0.302211	0.318077
8.2	Flower	0.00363123	0.0119034	0.302822	0.318357
8.1	Flower	0.00349426	0.0117071	0.303433	0.318635
8.0	Flower	0.00335947	0.011508	0.304043	0.318911
7.9	Flower	0.00322966	0.0113159	0.30464	0.319185
7.8	Flower	0.00309995	0.0111137	0.305244	0.319458

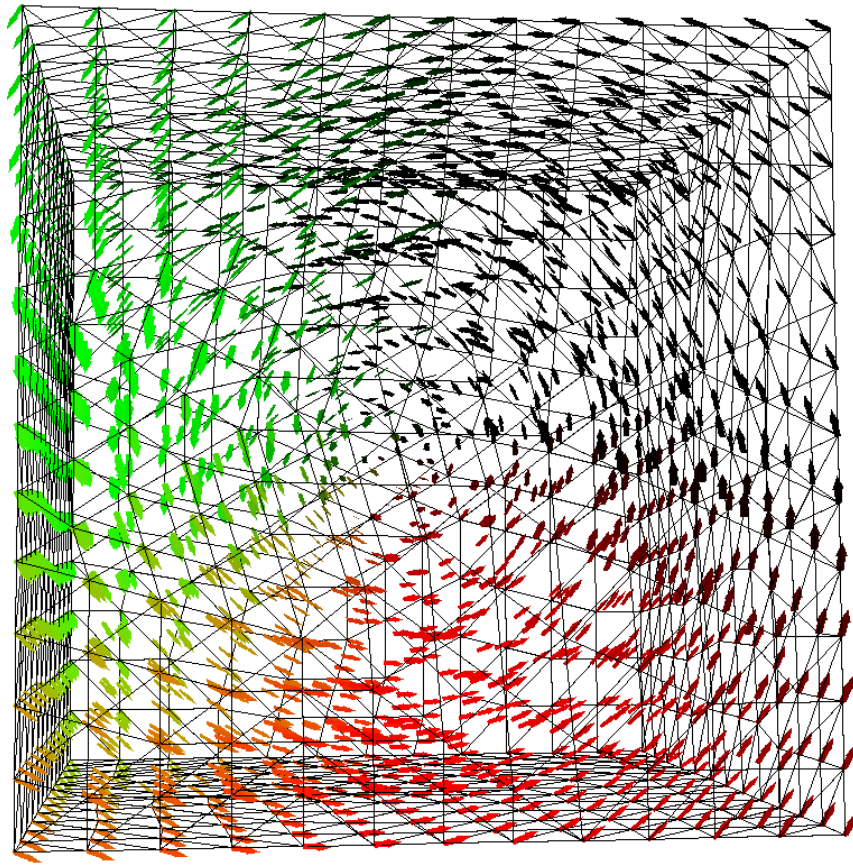


Abbildung 8.1: Vortex-Status

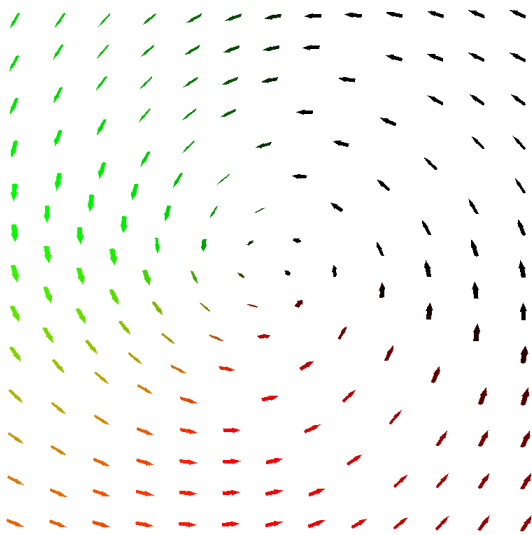


Abbildung 8.2: Vortex-Status Frontseite

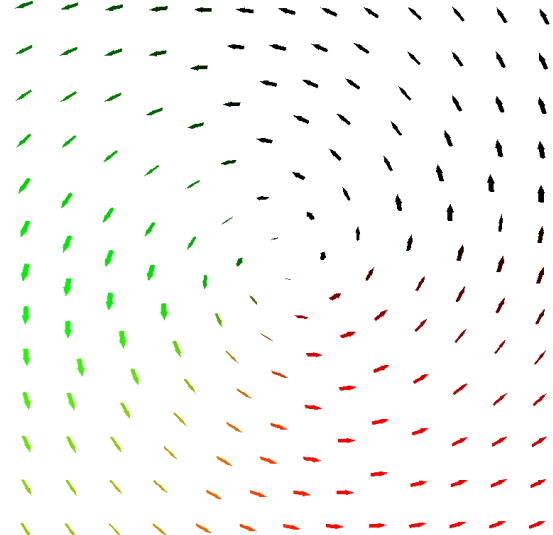


Abbildung 8.3: Vortex-Status Rückseite

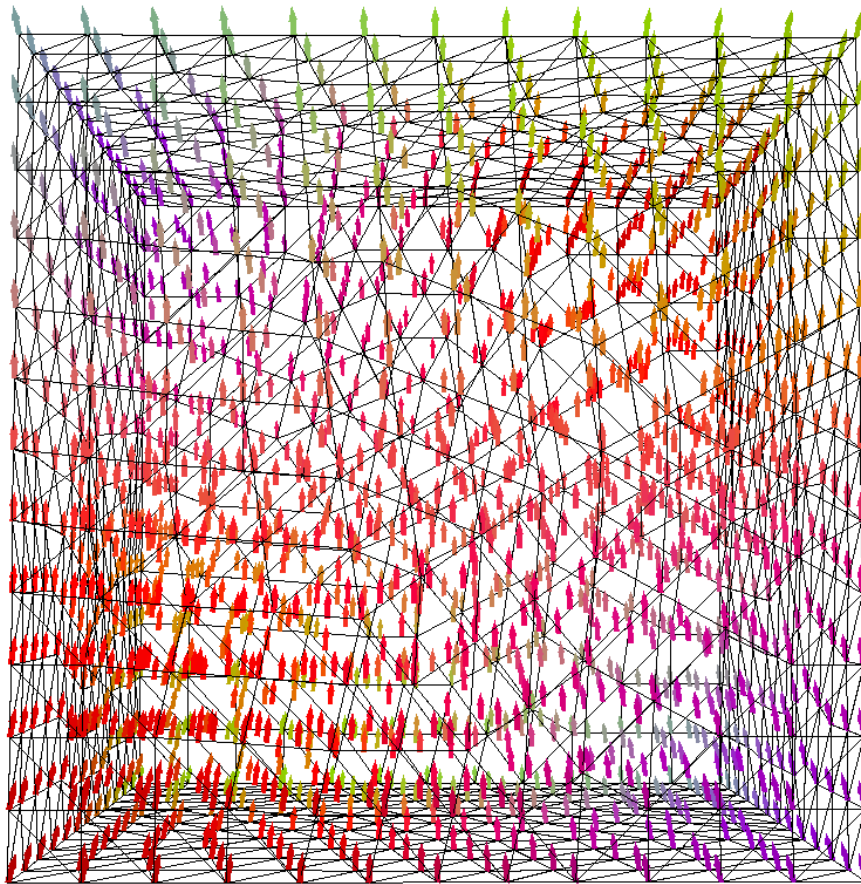


Abbildung 8.4: Flower-Status

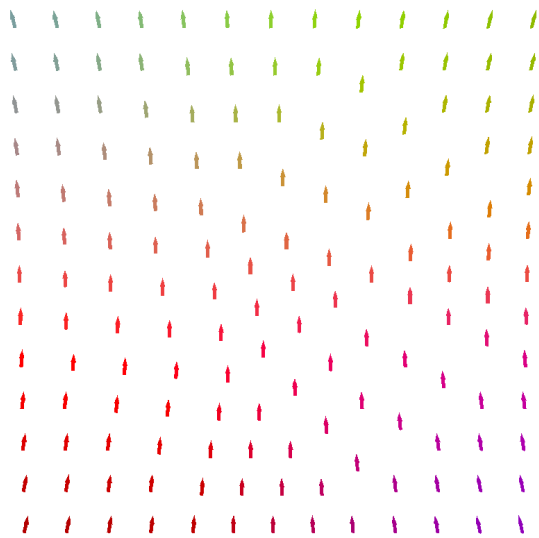


Abbildung 8.5: Flower-Status Frontseite

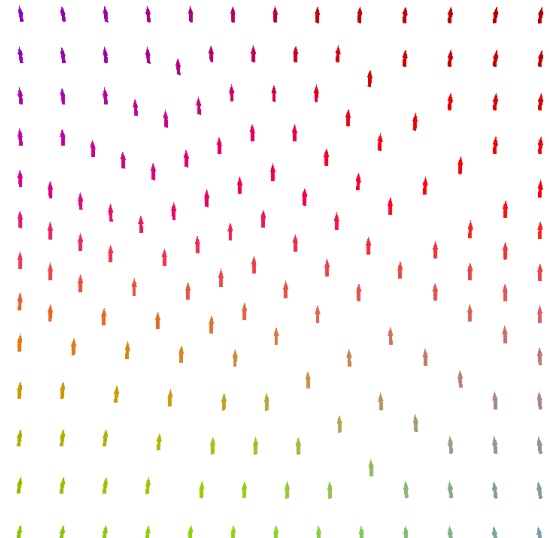


Abbildung 8.6: Flower-Status Rückseite

Literaturverzeichnis

- [1] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. On the theory of the dispersion of magnetic permeability in ferromagnetic bodies. *Phys. Z. Sowjetunion*, 8:153–169, 1935.
- [2] Carlos J. García-Cervera. Numerical micromagnetics: A review. *Bol. Soc. Esp. Mat. Apl. SeMA*, 39:103–135, 2007.
- [3] Francois Alouges, Sergio Conti, Antonio DeSimone, and Yvo Pokern. Energetics and switching of quasi-uniform states in small ferromagnetic particles. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 2:235–248, 2004.
- [4] R.D. McMichael. Standard problem number 3 - problem specification and reported solutions. <http://www.ctcms.nist.gov/~rdm/mumag.html>, 2008.
- [5] Dietrich Braess. *Finite Elemente*. Springer-Verlag, 2003.
- [6] Mario Bebendorf. *Hierarchical Matrices*. Springer, 2008.
- [7] Olaf Steinbach. *Numerische Näherungsverfahren für elliptische Randwertprobleme*. B. G. Teubner, 2003.
- [8] N. Popovic and D. Praetorius. Applications of \mathcal{H} -matrix techniques in micromagnetics. *Computing*, 74:177–204, 2004.
- [9] Carlos J. García-Cervera and Alexandre Roma. Adaptive mesh refinement for micromagnetics simulations. *IEEE Transactions on Magnetics*, 42, 2006.
- [10] Stefan Sauter and Christoph Schwab. *Randelementmethoden*. B. G. Teubner, 2004.
- [11] Anja Schlömerkemper. About solutions of poisson’s equation with transition condition in non-smooth domains. *Z. Anal. Anwend.* 27, 3:253–281, 2008.
- [12] Michael Duffy. Quadrature over a pyramid or cube of integrands with a singularity at a vertex. *SIAM J. Numer. Anal.*, 19, No. 6:1260–1262, 1982.
- [13] Martin Hanke-Bourgeois. *Grundlagen der Numerischen Mathematik und des Wissenschaftlichen Rechnens*. B. G. Teubner, 2006.
- [14] Eugene Tyrtshnikov. Mosaic-skeleton approximations. *Calcolo*, 33:47–57, 1996.
- [15] Christian Großmann and Hans-Görg Roos. *Numerische Behandlung partieller Differentialgleichungen*. B. G. Teubner, 2005.
- [16] Hiroshi Yabe. Global convergence of conjugate gradient methods for unconstrained minimization. *Nonlinear analysis and convex analysis*, pages 551–564, 2004.
- [17] Jorge Nocedal and Stephen J. Wright. *Numerical Optimization*. Springer, 1999.
- [18] Riccardo Hertel and Helmut Kronmüller. Finite element calculations on the single-domain limit of a ferromagnetic cube - a solution to μ mag standard problem no. 3. *Journal of magnetism and magnetic materials*, 238:185–199, 2002.